



*Escuela Técnica Superior de
Ingenieros de Caminos, Canales
y Puertos.*
UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



EVALUACIÓN DE LA PROBABILIDAD DE CONTAMINACIÓN POR CICLOHEXANO EN ZONAS PORTUARIAS.

APLICACIÓN EN LA BAHÍA DE SANTANDER.

Trabajo realizado por:

Hans Jefferson Jara Jara

Dirigido:

Dr. Andrés García Gonzáles

Dra. Ana Julia Abascal

Titulación:

**Máster Universitario en Gestión
Integrada de Sistemas Hídricos**

Santander, Octubre de 2019

TRABAJO FINAL DE MASTER

RESUMEN

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, el mayor porcentaje del comercio mundial se viene realizando a través de la industria naviera, por lo cual a lo largo del tiempo se fue incrementando la capacidad de transporte, así como la velocidad de carga y descarga de las embarcaciones en las zonas portuarias. Este incremento del transporte marítimo trajo consigo un incremento potencial del riesgo de accidentes por derrames de hidrocarburos y de sustancias peligrosas y nocivas (HNS, por sus siglas en inglés “*Hazardous and Noxious Substances*”). Si bien, en la actualidad existe una gran gama de modelos y metodologías para analizar los efectos por derrames de hidrocarburos, así como planes de prevención, mitigación y restauración, de los cuales casi todos están enfocados a zonas costeras y zonas de alta mar, existen muy poca información sobre la generación de modelos para HNS y su aplicación en zonas portuarias.

En base a esta realidad, el presente trabajo de fin de Máster (TFM) se enfocó en poder generar una metodología que permita evaluar la probabilidad de contaminación por HNS en la bahía de Santander, debido al gran impacto ambiental y socio-económico que pudieran generar los eventos de derrames. Del gran listado de HNS que existen a nivel mundial, se eligió el ciclohexano debido está presente de forma natural en todos los tipos de petróleo crudo y por su elevado nivel de toxicidad al ambiente y a las personas. Por lo cual, el presente TFM estableció los siguientes objetivos: (i) Determinar la probabilidad de contaminación derivada de un derrame de ciclohexano en el interior de la Bahía de Santander, identificando las potenciales zonas afectadas, (ii) Seleccionar los escenarios ambientales que condicionarán el comportamiento de la sustancia derramada, (iii) Realizar el modelado hidrodinámico de los escenarios ambientales seleccionados en el interior de la bahía de Santander, (iv) Analizar la sensibilidad del modelo numérico de derrames químicos a la variación del número de partículas y resolución espacial de la malla de cálculo, (v) Realizar el modelado numérico de derrame de químicos en función de los escenarios ambientales seleccionados al interior de la bahía de Santander y (vi) Analizar probabilísticamente la afección en la bahía de Santander bajo diferentes condiciones estacionales.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para el desarrollo de este TFM se emplearon datos meteo-oceanográficos y datos de caudal del río Miera. Para el cumplimiento de los objetivos, se desarrolló una metodología la cual estuvo conformada por 7 etapas: (I) Selección del escenario de derrame, (II) Selección de escenarios ambientales, (III) Análisis de sensibilidad I - Análisis de la influencia del caudal del río Miera, (IV) Modelado hidrodinámico de los escenarios seleccionados, (V) Análisis de sensibilidad II - Análisis del tamaño de malla y número de partículas, (VI) Modelado numérico de la evolución del derrame, y (VII) Análisis estadístico.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las forzantes seleccionadas para este trabajo fueron 5: vientos costeros (dirección e intensidad de vientos), marea astronómica (amplitud de marea, fases de marea), caudal del río Miera, temperatura del aire y del agua de mar (verano e invierno). Aplicando el primer análisis de sensibilidad, se determinó que el efecto que ejerce el caudal del río Miera sobre la hidrodinámica interna de la bahía de Santander es muy reducido, por lo cual no fue considerado en las simulaciones, generándose en total 125 escenarios de

simulación los cuales fueron simulados con el modelo hidrodinámico H2D. Antes de emplear el modelo numérico, se realizó el segundo análisis de sensibilidad en el cual se emplearon 4 tamaños de malla (25m, 50m, 100m y 150m) y 3 cantidades de partículas (1000, 10000 y 100000), determinando que mediante el empleo de una malla fina (50m) y 10000 partículas se obtuvo la mejor variación temporal del ciclohexano, tanto al inicio del vertido como minutos antes de que se genere su evaporación total. Por lo tanto, se emplearon los 125 simulaciones obtenidas con el modelo hidrodinámico H2D, 4 fases de marea, 4 valores de temperatura - (2) aire y (2) agua en verano e invierno - y el tamaño de malla y número de partículas óptimo para ejecutar el modelo numérico de derrame de químicos (TESEO), generándose en total 1000 escenarios de simulación, siendo 500 para la estación de verano y 500 para invierno.

Los mapas de probabilidad acumulada espacio – temporal muestran que en ambas estaciones las potenciales zonas afectadas por la contaminación del ciclohexano son los principales sectores socio-económicos (Puerto de Raos, Puerto deportivo y el Aeropuerto), en donde el nivel de afectación fue menor debido a que el ciclohexano no llegó hasta la costa, descartándose una posible afectación toxicológica a las personas. Pero, en las zonas de recreación y turismo (el Puntal, playa La Magdalena y Puerto chico) el ciclohexano presentó una alta probabilidad de contaminación, llegando incluso hasta la costa, lo que representa un riesgo de afectación toxicológica a las personas (Fig. 1).

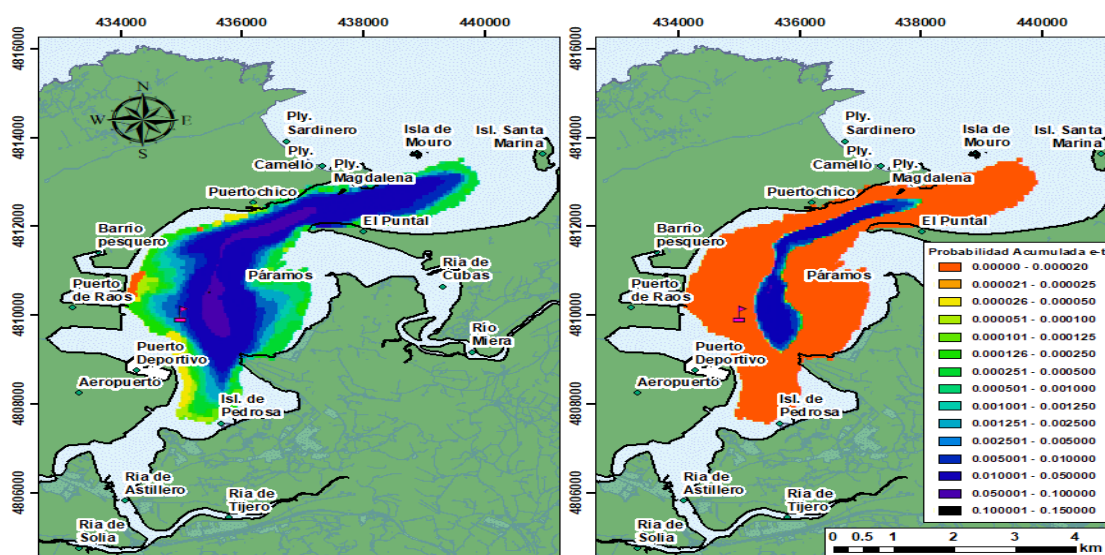


Fig. 1. Mapas de probabilidad acumulada espacio – temporal de contaminación del ciclohexano al interior de la bahía de Santander, para la estación de invierno (izquierda) y verano (derecha).

CONCLUSIONES

Se concluye que la probabilidad de contaminación derivada del derrame de ciclohexano en el interior de la bahía de Santander, es mayor en invierno que en verano, debido que la capacidad de evaporación del ciclohexano se ve reducida en condiciones bajas de temperatura. Si bien, en el proceso de selección de las forzantes, del número de valores de cada forzante y en los análisis de sensibilidad se realizaron simplificaciones debido a tiempo de simulación y coste computacional, los valores de probabilidad acumulada fueron aceptables, permitiendo determinar la probabilidad de contaminación de diversas zonas al interior de la bahía de Santander.

ABSTRACT

INTRODUCTION

Currently, the largest percentage of world trade has been carried out through the shipping industry, so over time the transport capacity was increased, as well as the speed of charging and discharging of vessels in port areas. This increase in the maritime transport brought with it a potential increase in the risk of accidents from oil spills and hazardous and harmful substances (HNS). Although, at present there exists a large range of models and methodologies to analyze the effects by oil spills, as well as plans of prevention, mitigation and restoration, of which almost they all are focused on coastal zones and areas of open sea, but exist very little information about the generation of models for HNS and its application in port areas.

Based on this reality, the present Master's Degree work (TFM) focused on being able to generate a methodology that allows to evaluate the probability of contamination by HNS in the bay of Santander, due to the great environmental and socio-economic impact that could generate the spill events. From the large list of HNS that exist worldwide, cyclohexane was chosen because it is naturally present in all types of crude oil and because of its high level of toxicity to the environment and people. Therefore, the present TFM established the following objectives: (i) Determine the likelihood of contamination from a cyclohexane spill inside the bay of Santander, identifying the potential affected areas, (ii) Select of environmental scenarios that will constrain the behavior of the substance shed, (iii) Realize the hydrodynamic modeling of the environmental stages selected inside the bay of Santander, (iv) Analyze the sensitivity of the numerical model of chemical spills to the variation in the number of particles and spatial resolution of the mesh of calculation, (v), (vi) realize the numerical modeling of chemical spills in functions of the environmental scenarios selected inside the bay of Santander, and (vii) Analyze probabilistically the condition in bay of Santander under different seasonal conditions.

MATERIALS AND METHODS

For the development of this TFM were used meteo-oceanographic data and Miera river flow data. For the fulfilment of the objectives, a methodology was developed which consisted of 7 stages: (I) Selection of the spill scenario, (II) Selection of environmental scenarios, (III) Sensitivity analysis I – Analysis of the flow influence of the Miera river, (IV) Hydrodynamic modeling of selected scenarios, (V) Sensitivity analysis II – Analysis of mesh size and particle number, (VI) Numerical modeling of spills evolution, and (VII) Statistical analysis.

RESULTS AND DISCUSSION

The forcings selected for this work were 5: coastal winds (direction and intensity of winds), astronomical tide (tidal amplitude, tidal phases), flow of Miera river, and air and sea surface temperature (summer and winter). Applying the first sensitivity analysis, it was determined that the effect of the flow of Miera river on the hydrodynamics inside the bay of Santander is very limited, so it was not considered in the simulations, generating a total of 125 scenarios of simulation which were simulated with the hydrodynamic model H2D. Before using the numerical model, the second sensitivity analysis was performed in which 4 mesh size (25m, 50m, 100m and 150m) and 3 particle quantities (1000, 10000 and 100000) were used, determining that by using a fine mesh (50m) and 10000 particles obtained the best temporal variation of cyclohexane, both at the beginning of the discharge and minutes before its total evaporation is generated. Therefore, were used 125 simulations were obtained with hydrodynamic model H2D, 4 tidal phases, 4

temperature value – (2) air and (2) water in summer and winter – and the optimal mesh size and particle number, to run the numerical model of chemical spill (TESEO), generating a total of 1000 simulation scenarios, being 500 for the summer season and 500 for winter season.

The maps of cumulative probability spatio – temporal show that in both stations the potential areas affected by cyclohexane contamination are the main socio – economic sectors (Port of Raos, Moorland and Airport), where the level of affectation was lower due to the cyclohexane did not arrive until the coast, discarding a possible allocation toxicological to people. But, in areas of recreation and tourism (El Puntal, Magdalena beach and Puerto chico), cyclohexane presented a high probability of contamination even reaching to the coast, which represents a risk of affectation toxicological to people (Fig. 1).

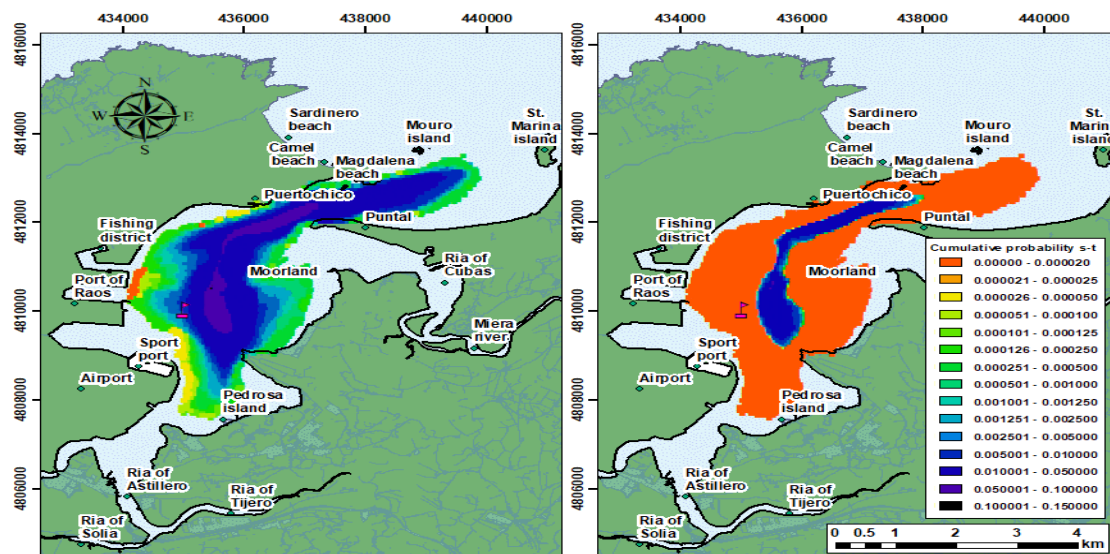


Fig. 1. Maps of cumulative probability spatio – temporal of contamination of cyclohexane to inside of bay of Santander, for winter season (left) and summer season (right).

CONCLUSIONS

It is concluded that the likelihood of contamination resulting from the cyclohexane spill inside of bay of Santander, is higher in winter than in summer, because the evaporation capacity of cyclohexane is reduced in low temperature conditions. While, in the process of selecting the forcings, the number of values of each forcing and in the sensitivity analyses were made simplifications due to time of simulation and computational coast, the values of the cumulative probability were acceptable, allowing to determine the probability of contamination of various areas inside of bay of Santander.

ÍNDICE

CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. ANTECEDENTES.....	1
1.2. ESTADO DEL CONOCIMIENTO	3
CAPÍTULO II: OBJETIVOS	7
2.1. OBJETIVO GENERAL	7
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	7
CAPÍTULO III: MATERIALES Y MÉTODOS	8
3.1. ÁREA DE ESTUDIO	8
3.2. DATOS DE PARTIDA	10
3.3. SOFTWARES	11
3.3.1. R & Matlab	11
3.3.2. ArcGIS	12
3.4. MODELOS NUMÉRICOS.....	12
3.4.1. Modelo Numérico Hidrodinámico de Propagación de Onda Larga (H2D).....	12
3.4.2. Modelo numérico de derrame de sustancias químicas (TESEO)	13
3.5. METODOLOGÍA	17
3.5.1. Etapa I: Selección del escenario de derrame	19
3.5.2. Etapa II: Selección de escenarios ambientales	19
3.5.3. Etapa III: Análisis de sensibilidad I – Análisis de la influencia del caudal del río Miera	21
3.5.4. Etapa IV: Modelado hidrodinámico de los escenarios seleccionados	21
3.5.5. Etapa V: Análisis de sensibilidad II – Análisis del tamaño de malla y el número de partículas.....	21
3.5.6. Etapa VI: Modelado numérico de la evolución del derrame	22
3.5.7. Etapa VII: Análisis estadístico.....	22
CAPÍTULO IV: RESULTADOS.....	24
4.1. SELECCIÓN DEL ESCENARIO DE DERRAME	24
4.2. SELECCIÓN DE ESCENARIOS AMBIENTALES	25
4.2.1. Vientos costeros	26
4.2.1.1. Direcciones de viento	26

4.2.1.2. Intensidades de viento	27
4.2.2. Marea astronómica.....	30
4.2.2.1. Amplitud de marea.....	31
4.2.2.2. Fases de marea.....	31
4.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD I – ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL CAUDAL DEL RÍO	
MIERA	32
4.3.1. Caracterización del caudal del río Miera	32
4.3.2. Configuración del modelo hidrodinámico H2D.....	33
4.3.3. Modelado hidrodinámico	34
4.4. MODELADO HIDRODINÁMICO DE LOS ESCENARIOS SELECCIONADOS	35
4.5. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD II – TAMAÑO DE MALLA Y Nº DE PARTÍCULAS	39
4.5.1. Combinación del número de partículas y tamaño de malla	39
4.5.2. Configuración del modelo numérico TESEO	39
4.5.2. Análisis del vertido.....	41
4.5.2.1. Análisis al inicio del vertido	41
4.5.2.2. Análisis antes de la evaporación del vertido	42
4.5.3. Análisis del gasto computacional.....	44
4.6. MODELADO NUMÉRICO DE LA EVOLUCIÓN DEL DERRAME	45
4.7. MAPAS DE PROBABILIDAD ACUMULADA	45
4.7.1. Probabilidad acumulada en invierno	45
4.7.2. Probabilidad acumulada en verano	46
CAPÍTULO V: CONCLUSIONES	48
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	49

CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN

1.1. ANTECEDENTES

Actualmente, más del 90% del comercio mundial es realizado a través de la industria naviera (UNCTAD, 2018; Walker et al., 2018), la cual en los últimos años ha incrementado la capacidad de carga y transporte de las embarcaciones (Walsh et al., 2019) con la finalidad de cubrir las diversas demandas del mundo actual. Este gran incremento del transporte marítimo, trae consigo un incremento potencial del riesgo por accidentes de derrames de hidrocarburos así como de sustancias peligrosas y nocivas (HNS, por sus siglas en inglés “Hazardous and Noxious Substances”) (Cunha, Oliveira, Neuparth, Torres, & Santos, 2016; Illiyas & Mohan, 2016), además en la actualidad el transporte de sustancias químicas se ha incrementado debido al continuo desarrollo de la industria química (Neuparth et al., 2013) a nivel mundial.

A nivel internacional las HNS son definidas como *“sustancias distintas a los hidrocarburos, las cuales son introducidas al ambiente marino, producto de un accidente de derrames, pueden generar eventos de alta peligrosidad para la flora y fauna marina, la salud humana, el uso pleno de los servicios ecosistémicos e interferir con todos los usos potencialmente legítimos del mar”* (Harold, de Souza, Louchart, Russell, & Brunt, 2014; Legrand et al., 2017). Cabe resaltar, que para que una sustancia química sea clasificada como una HNS debe ser inflamable, tóxica, corrosiva, infecciosa, reactiva y/o radiactiva (Illiyas & Mohan, 2016).

En consecuencia, en las últimas décadas los eventos de contaminación por derrames accidentales de HNS se viene incrementando (Neuparth et al., 2013; Neuparth, Moreira, Santos, & Reis-Henriques, 2011), debido a que de 37 millones de sustancias químicas empleadas a nivel mundial, más de 2000 HNS son transportados por la industria naviera (Illiyas & Mohan, 2016; Legrand et al., 2017; Tornero & Hanke, 2016; Walker et al., 2018) y de estas, 100 HNS son las más transportadas a través del Atlántico Europeo (Neuparth et al., 2011). Asimismo, se espera que para el 2019 el porcentaje de HNS transportadas por el mar se incremente a más de 16% (Cunha, Moreira, & Santos, 2015).

Este incremento del transporte de HNS aumenta el riesgo de eventos de derrames accidentales (Cunha et al., 2016), debido a posibles colisiones, fallas mecánicas o humanas, encallamiento de embarcaciones, etc. (Illiyas & Mohan, 2016), los cuales en

caso de originarse podrían generar severos impactos de contaminación en mar abierto, afectando a la fauna marina (mamíferos, cetáceos y recursos de relevancia económica), como en zonas marino-costeras (Amir-Heidari & Raie, 2018; Cucco et al., 2012). Ésta afectación podría abarcar 3 niveles: nivel biológico, por la afectación a la fauna marina (vertebrados e invertebrados) (Baawain, Sana, Al-Sabahi, Al-Wardy, & Al-Yaqoobi, 2011), a las aves (Chen et al., 2019) y a la fauna terrestre, en donde el grado de afectación estará en función de las concentraciones del HNS derramadas; nivel ecológico, afectando principalmente a las zonas intermareales y submareales por el grado de daño y degradación ambiental; y a nivel socioeconómico (Amir-Heidari & Raie, 2018; Cucco et al., 2012), debido a sus impactos sobre la salud humana, actividades turísticas y recreativas, pesca deportiva y artesanal en zonas próximas a la costa (Zhang et al., 2018), incrementos en los costos de control, recuperación, limpieza y monitoreo (R J Law & Campbell, 1998).

Cabe resaltar que, si bien los derrames de HNS ocurren en menor frecuencia a los derrames de hidrocarburos, las consecuencias ambientales que pueden generar las HNS son más desastrosas (Illiya & Mohan, 2016; Kirby & Law, 2010; Neuparth et al., 2013). Asimismo, la información disponible sobre los impactos que generan los derrames de HNS a nivel mundial, son limitadas en comparación a la información sobre los impactos de derrames de hidrocarburos (Kirby & Law, 2010). A continuación se detallan algunos eventos de derrames de HNS a nivel mundial en zonas de alta mar y en zonas próximas a la costa:

- **MV Perintis:** Fue una embarcación que se hundió el 13 de marzo de 1989, a 58km de las costas de Brixham en el canal inglés. Este buque llevaba cantidades significantes de 3 pesticidas, siendo estas: lindano (5.8t), permitina (1t) y cipermitina (0.6t). El área en donde esta embarcación se hundió, era considerada un área de intensa actividad pesquera por parte de pescadores franceses como ingleses (R. J. Law & Allchin, 1994; R J Law & Campbell, 1998), generando un mayor impacto ambiental y socio-económico.
- **Levoli Sun:** Fue un buque que transportaba productos químicos, provenía de Fawley, Reino Unido, hacía Berre, y se hundió el 31 de octubre del 2000, aproximadamente a 11 millas de Alderney en el Canal inglés. Este buque llevaba una carga mixta compuesta por: estireno (4000t), butano (1000t) y alcohol isopropílico (1000t). Estos químicos presentaron una escala baja a moderada toxicidad para la vida marina, además de no ser persistentes en el medio marino y presentar una baja bioacumulación (Robin J. Law, Kelly, Matthiessen, & Aldridge, 2003).

- **MSC Napoli:** Fue un buque portacontenedores, que se hundió el 18 de enero del 2007 a ochenta kilómetros al sur de Lizard (Cornualles, Reino Unido) debido a que las fuertes tormentas e intenso oleaje generaron una grieta en el casco del buque. Este buque transportaba 41473 toneladas de carga, de las cuales 1684 toneladas fueron clasificadas como HNS por los criterios de la Organización Marítima Internacional (OMI). El derrame de estas sustancias provocó severos daños ambientales en el área próxima a la zona del accidente debido a derrames químicos tóxicos (Readman, Guitart, Frickers, & Law, 2007).

Para mayor información sobre los diversos eventos de derrames de HNS en diferentes partes del mundo se puede revisar el siguiente link: www.ciimar.up.pt/hns.

En vista de los potenciales eventos de contaminación por derrames accidentales es importante poder valorar el nivel de riesgo, el cual permite obtener ventajas en la gestión frente a un evento de vertido accidental, puesto que permite identificar las zonas afectadas, las probabilidades de ocurrencia y la generación de estrategias de gestión (Schneiderbauer & Ehrlich, 2004). En diversas investigaciones en la actualidad, el riesgo depende de 3 componentes: peligrosidad (P), exposición (E) y vulnerabilidad (V), la conjugación de estas componentes es conocido como el triángulo del riesgo (**Fig. 1**).



Fig. 1. Triángulo de Riesgo (Schneiderbauer & Ehrlich, 2004)

La presente investigación se enfocó en la problemática de la peligrosidad, la cual fue determinada por la probabilidad del derrame accidental al interior de la bahía de Santander.

1.2. ESTADO DEL CONOCIMIENTO

Los eventos de derrames de HNS presentan una gran dificultad de rápida actuación (Alves et al., 2015) debido a que estos eventos, en mayor parte, se originan en zonas

próximas a la costa (Amir-Heidari & Raie, 2018) o en zonas portuarias de gran tránsito marítimo de embarcaciones tanqueras de gran tamaño. Además, se le debe sumar a esta reducida capacidad de actuación, que los eventos océano-atmosféricos tienen una gran influencia sobre el transporte, biodegradación, evaporación y variaciones sobre el tiempo de llegada de los derrames de sustancias peligrosas (Socolofsky et al., 2019; Vergeynst et al., 2018; Yu et al., 2018) en dirección a las zonas costeras.

Desde la década de los 70s, en vista del gran aumento de los eventos de derrames de hidrocarburos (Chen et al., 2019) en zonas costeras o en zonas de alta mar, se comenzaron a desarrollar diversos modelos y metodologías (Amir-Heidari & Raie, 2018; Nelson, Grubestic, Sim, Rose, & Graham, 2015) para poder analizar el comportamiento de las propiedades físico-químicas de los hidrocarburos y poder predecir, prevenir, analizar y reducir los riesgos ambientales y socio-ecosistémicos. A continuación se detallan algunos de los principales programas desarrollados:

- “Trajectory Analysis Planner (TAP II)” es un software creado por la Administración Nacional Atmosférica y Oceánica (NOAA), para determinar las probabilidades de movimiento y dispersión de los derrames de hidrocarburos en zonas marinas, grandes bahías y/o ensenadas con intenso flujo marítimo (Barker, 2003; NOAA, 2015; Samuels, Amstutz, Bahadur, & Ziemniak, 2013).
- “Automated Data Inquiry for Oil Spills (ADIOS)” es un software creado por la NOAA, diseñado para determinar el destino de diversas sustancias a corto plazo, estimando el tiempo de permanencia de estas sustancias en el ambiente (Samuels et al., 2013).
- “General NOAA Operational Modeling Environment (GNOME)”, fue creado para el modelamiento de los contaminantes en ambientes oceánicos (Beegle-Krause, 2001).
- OSCAR, fue desarrollado para el desarrollo de planes de contingencia ante eventos de derrames de sustancias peligrosas (SINTEF, 2010).
- “Modelo numérico de derrame de químicos (TESEO)” fue desarrollado por Instituto de Hidráulica Ambiental de la Universidad de Cantabria “**IHCantabria**”, este programa tiene por objetivo el integrar datos meteo-oceanográficos y datos de las propiedades de la sustancia a simular, requeridos para proveer la evolución, transporte y degradación del contaminante derramado en mar abierto o en zonas estuarinas (A.J. Abascal et al., 2007; Ana J. Abascal, Cárdenas, Castanedo, & Medina, 2011), además de objetos flotantes a la deriva (Ana J. Abascal et al., 2011).

Cabe mencionar que, debido al incremento del comercio de HNS y del número de derrames accidentales, los modelos previamente desarrollados se tratan de aplicar al análisis de HNS, pero debido a la gran complejidad de las sustancias químicas, existe

un vacío en el estado del conocimiento para disponer de herramientas similares a las existentes para hidrocarburos. Por lo cual, se vienen desarrollando nuevos programas computacionales que buscan poder predecir con el menor sesgo de error e incrementando el nivel de acierto de predicción, combinando diversos modelos numéricos de alta resolución espacial en zonas costeras (Cucco et al., 2012), con la finalidad de poder predecir las zonas de mayor probabilidad de llegada de cualquier sustancia peligrosa producto de un derrame accidental.

En la actualidad se vienen desarrollando diversos proyectos y herramientas a nivel mundial, tales como:

- MARPOCS (Multinational Response and Preparedness to oil chemical spills), es el Proyecto europeo para combatir la contaminación marina en el Atlántico Nororiental, el cual surgió debido a la necesidad de poder actuar frente a eventos de contaminación marina a escala regional, permitiendo el intercambio de información con la finalidad de poder fortalecer las capacidades de actuación frente a eventos de contaminación accidental en esta subregión transfronteriza. Para mayor información se puede revisar el siguiente link: <http://marpocs.eu/project/>.
- HNS-MS, es una herramienta de las autoridades belgas y francesas, desarrollada para analizar el comportamiento de las HNS que son liberadas accidentalmente en el medio marino (zonas de alta mar o en zonas costeras). Esta herramienta permite realizar los pronósticos de derivas y potenciales puntos de llegada. Para mayor información se puede revisar el siguiente link: <https://www.hns-ms.eu/#>.
- El proyecto ARCOPOL, tuvo como objetivo el resguardar la seguridad marítima del Atlántico, reforzando la protección de las regiones costeras contra la contaminación de sustancias potencialmente peligrosas. Para lo cual se desarrolló un sistema de detección, monitoreo y predicción. Para mayor información se puede revisar el siguiente link: <http://www.arcopol.eu/>.

Cabe mencionar que si bien estos proyectos están enfocados en analizar la problemática de un derrame accidental en zonas costeras o de mar abierto, bajo una escala de análisis regional. No se enfocan en analizar el riesgo que generaría un derrame accidental en zonas portuarias y a una escala local.

Para el desarrollo de la presente investigación se eligió como HNS de estudio al ciclohexano (también conocido como hexahidrobenceno, hexametileno o hexanafteno) (Gad, 2014; INSHT, 2009; Luttrell & Lyiza, 2010) debido a que está presente de forma

natural en todos los tipos de petróleo crudo, pero en niveles inferiores a 1% (INSHT, 2009). A nivel mundial, la producción mundial de ciclohexano es de 4400 kilotoneladas (kt), mientras que a nivel de la Unión Europea se produce cantidades que varían entre 828 a 963 kt (Salamanca, Dobslaw, & Engesser, 2017).

Dentro de sus propiedades físico-químicas se conoce que es una sustancia incolora, altamente inflamable, su punto de fusión y su punto de ebullición son 6.5°C y 80.7°C, respectivamente (INSHT, 2009; Luttrell & Lyiza, 2010), además de ser un compuesto altamente volátil con una solubilidad de 55mg/l en el agua (Salamanca et al., 2017). A nivel toxicológico, el ciclohexano puede estar en la atmosfera solamente como vapor y su degradación se realiza mediante reacciones fotoquímicas, siendo su vida media de entre 3 horas a 3 días y medio en aguas de río y en lagos, además se estima que la capacidad de bioconcentración y bioacumulación en organismos acuáticos es moderada, debido a que su baja biodegradación.

Bajo estas premisas, el presente trabajo de fin de Máster (TFM) tiene como objetivo el determinar la probabilidad de contaminación derivada de un derrame de ciclohexano, bajo un enfoque de acierto y desacierto, y los potenciales efectos de contaminación que pueden ocurrir en las zonas marino-costeras del interior de la Bahía de Santander.

CAPÍTULO II: OBJETIVOS

Para el desarrollo del presente trabajo de fin de Máster, se establecieron los siguientes objetivos:

2.1. OBJETIVO GENERAL

Determinar la probabilidad de contaminación derivada de un derrame de ciclohexano en el interior de la Bahía de Santander, identificando las potenciales zonas afectadas.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Seleccionar los escenarios ambientales que condicionarán el comportamiento de la sustancia derramada.
- Realizar el modelado hidrodinámico de los escenarios ambientales seleccionados en el interior de la bahía de Santander.
- Analizar la sensibilidad del modelo numérico de derrames químicos a la variación del número de partículas y resolución espacial de la malla de cálculo.
- Realizar el modelado numérico de derrame de químicos en función de los escenarios ambientales seleccionados al interior de la bahía de Santander.
- Analizar probabilísticamente la afección en la bahía de Santander bajo diferentes condiciones estacionales.

CAPÍTULO III: MATERIALES Y MÉTODOS

3.1. ÁREA DE ESTUDIO

La Bahía de Santander está ubicada en la comunidad autónoma de Cantabria, al norte de España (Viguri, Verde, & Irabien, 2002), esta bahía es el mayor estuario de Cantabria, con una superficie de 2346 ha y un perímetro de 90 Km (Juanes et al., 2012; Pérez-fernández, Viñas, & Besada, 2019) (Fig. 2).

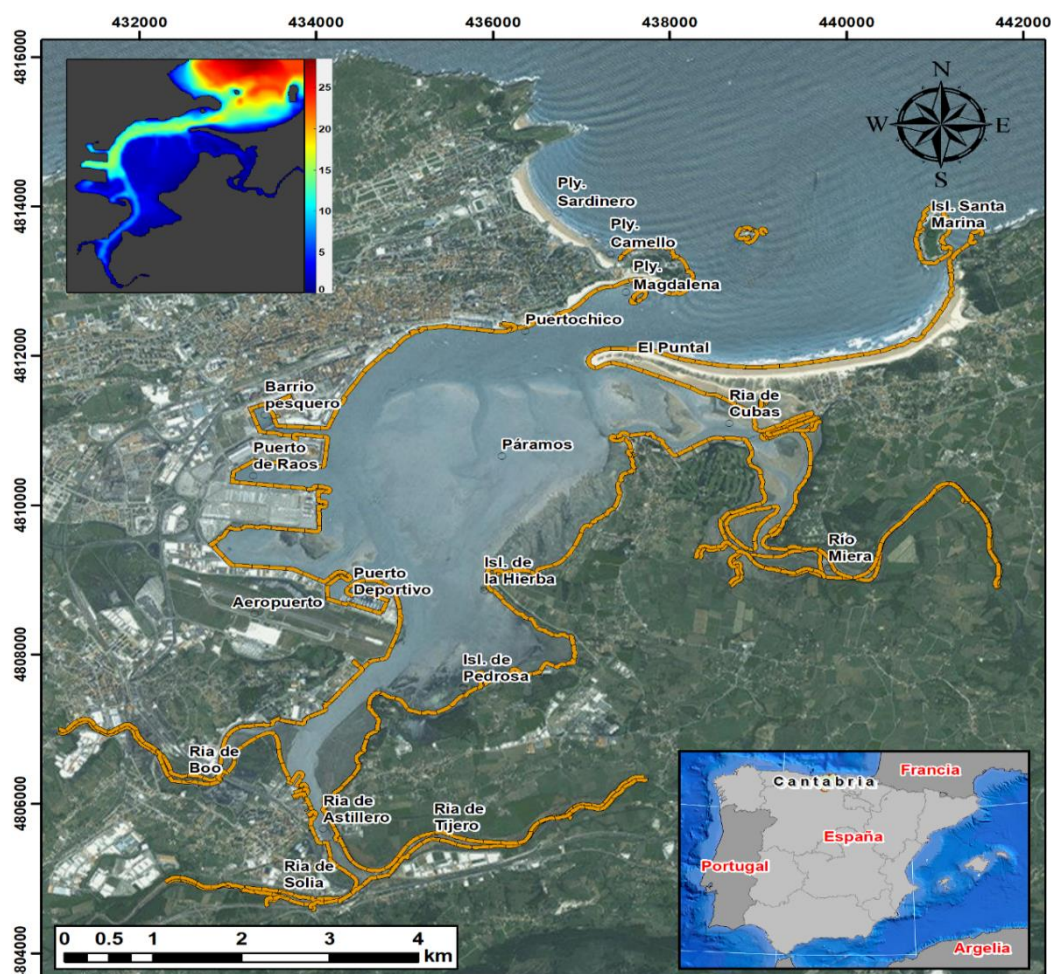


Fig. 2. Ubicación geográfica de la bahía de Santander, comunidad autónoma de Cantabria – España.

La cobertura de la zona intermareal es de 1053.91 ha y está concentrada en los páramos de la margen derecha de la bahía (Juanes et al., 2012), en esta zona la profundidad oscila entre 5 a 8 m, las zonas submareales presentan una profundidad máxima de 12 m debido al canal de navegación (Juanes et al., 2012), mientras que a fuera de El puntal se obtienen profundidades de hasta 28 m.

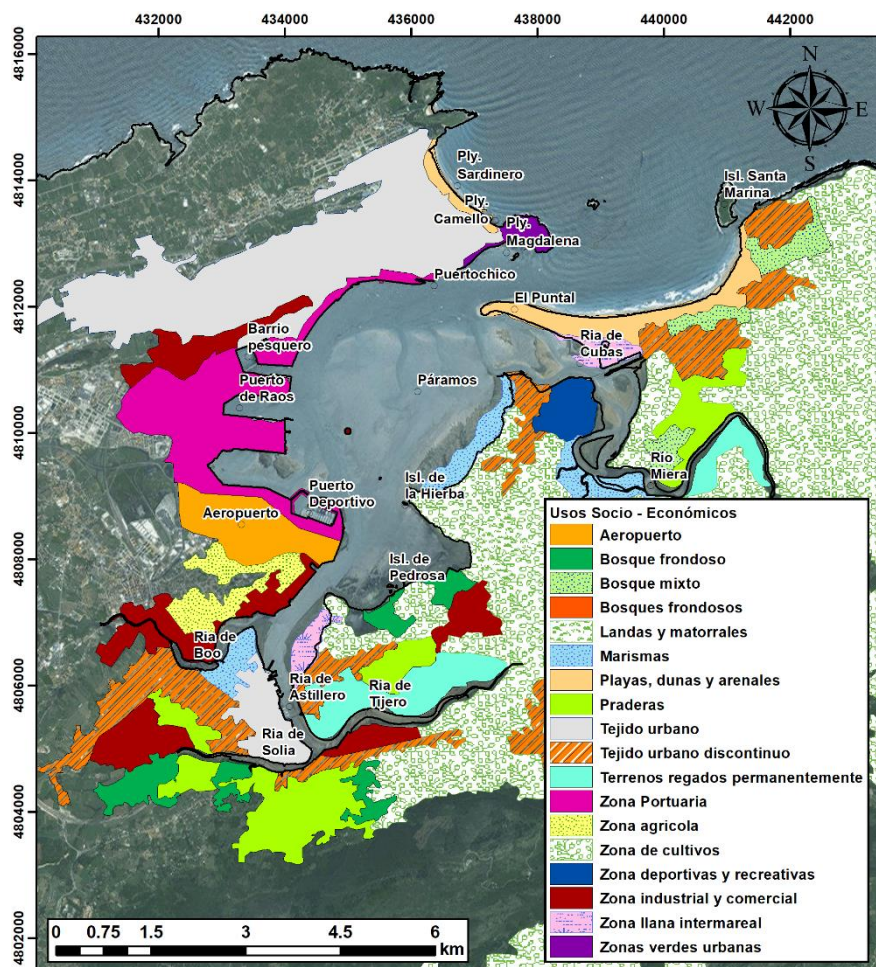


Fig. 3. Usos socio-económicos próximos a la bahía de Santander.

Además, dentro de la actividad industrial hay que destacar las actividades metalúrgicas, construcción de embarcaciones, químicas y farmacéuticas. Todas estas actividades están localizadas principalmente en el Puerto y en diversos polígonos industriales ubicadas a lo largo de toda la zona costera (Pérez-fernández et al., 2019; Rial et al., 2017; Viguri et al., 2002). Cabe destacar que en el interior de la bahía, está el pantanal de Repsol en donde atracan buques de gran calado que transportan, cargan y descargan gases licuados derivados del petróleo.

3.2. DATOS DE PARTIDA

Para el desarrollo del presente TFM, se emplearon diversos datos meteo-oceanográficos y de caudal del río Miera (Fig. 4), estos datos fueron recopilados de diversas instituciones, tal y como se detalla en la Tabla 1. Cabe mencionar que si bien los datos presentan una diferente resolución temporal, se empleó una media diaria y un periodo temporal de 1970 a 2019.

Tabla 1. Datos meteo-oceanográficos de la bahía de Santander.

FORZANTES	FUENTE	RESOLUCIÓN TEMPORAL	RESOLUCIÓN ESPACIAL	PERIODO	UNIDAD
Vientos costeros	Wind HR SeaWind NCEP (IH Cantabria)	1 hora	$\Delta x = \Delta y \approx 0.02^\circ$	01/02/1948 – 31/12/2009	m/s
Marea astronómica	DOW SeaWind NCEP (IH Cantabria)	1 hora	$\Delta x \approx 0.005^\circ$ $\Delta y \approx 0.004^\circ$	01/02/1948 – 31/12/2008	m
Caudal	“Actualización del Estudio de Recursos Hídricos de los ríos de la vertiente norte de Cantabria” (2008) (IH Cantabria)	1 día	-	01/10/1970 – 31/12/2008	m ³ /s
Temperatura superficial del mar	Red de Calidad Ambiental (IH Cantabria)	-	-	2005 – 2019	°C
Temperatura superficial del aire	Agencia Estatal de Meteorología (AEMET)	-	-	01/01/1997 – 18/01/2019	°C

Asimismo, de la serie de datos de temperatura superficial del agua y del aire, solo se emplearon valores promedio superficiales para las estaciones de verano e invierno.

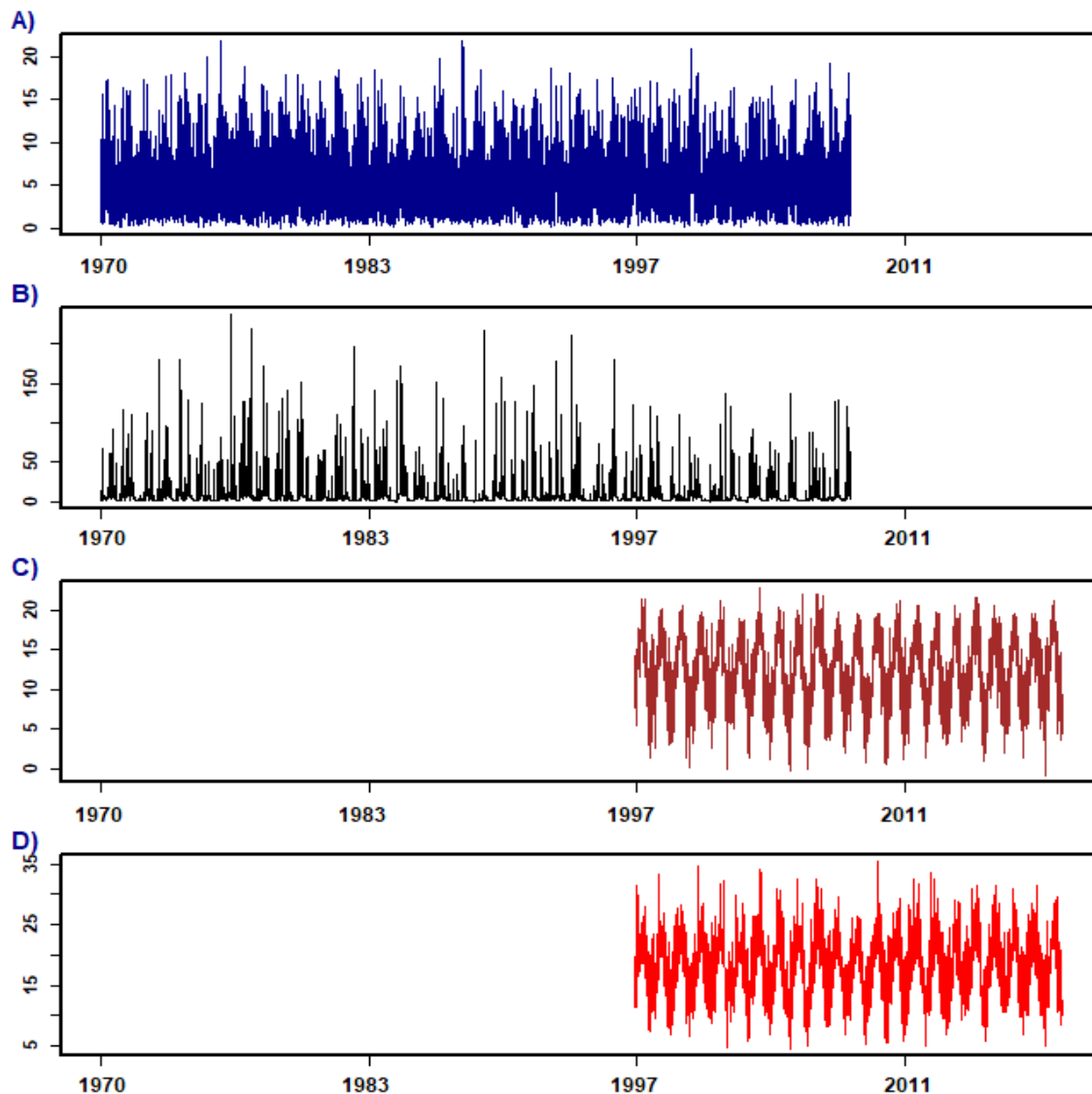


Fig. 4. Series temporales de (A) intensidad del viento costero, (B) niveles de caudales del río Miera, (C) temperatura mínima aire y (D) temperatura máxima del aire. Eje temporal está comprendido desde 1970 hasta 2019, con una frecuencia diaria.

3.3. SOFTWARES

3.3.1. R & Matlab

R es un lenguaje de programación de libre acceso (Plakidas, Schall, & Zdun, 2017), siendo principalmente empleado para el análisis estadístico de datos y generación de gráficos (Plakidas et al., 2017; Wallach, Makowski, Jones, & Brun, 2019). Asimismo, Matlab es un software de análisis numérico muy potente que emplea diferentes herramientas con la finalidad de poder resolver diversos problemas estadísticos (Keviczky, Bars, Hetthéssy, & Bányász, 2019; King & Aljabar, 2017).

Para el procesamiento de los datos meteo – oceanográfico y caudales del río Miera, se emplearon los softwares R y Matlab, en los cuales se crearon diversos scripts y funciones que permitieron automatizar el proceso de análisis de los datos.

3.3.2. ArcGIS

Los Sistemas de Información Geográfica (GIS), son un conjunto de herramientas relacionadas al análisis de datos geográficos y su variación espacio-temporal en una zona determinada (Goodchild, 2015), y son empleados como una efectiva herramienta para la gestión de recursos y en el análisis de impactos ambientales (Zhong, Zhou, & Wang, 2011). Por tal motivo, este software fue empleado para la generación de bases de ubicación geográfica de la zona de estudio, mapa de usos socio económicos, y mapas de probabilidades de contaminación del ciclohexano en la bahía de Santander.

3.4. MODELOS NUMÉRICOS

3.4.1. Modelo Numérico Hidrodinámico de Propagación de Onda Larga (H2D)

El modelo hidrodinámico H2D fue desarrollado por el Grupo de Ingeniería Oceanográfica y de Costas de la Universidad de Cantabria, orientado al estudio de la hidrodinámica del medio marino, empleando como datos de partida la marea astronómica, vientos costeros, variaciones horizontales de densidad, descargas fluviales y Coriolis.

Este modelo resuelve las ecuaciones de ondas largas ($L > h$), en donde “L” es la longitud de onda y “h” es la profundidad sobre la cual se propaga, además el flujo es horizontal y sus componentes horizontales (u, v) son mucho mayores que la componente vertical (w) (Otero Díaz, 2005). Debido a que el flujo horizontal es mucho mayor que el flujo vertical, se puede simplificar las ecuaciones de Navier – Stokes, eliminando la componente vertical e integrándose en profundidad. Cabe mencionar que estas condiciones solo se cumplen para zonas con pendientes poco pronunciadas, o en zonas sin procesos de upwelling o downwelling, y estas condiciones son las que podemos encontrar en la bahía de Santander.

Para determinar las ecuaciones generales de onda larga, se deben considerar como ecuaciones de gobierno a las ecuaciones de conservación del momento (Eq. 1) y de conservación de la masa de fluido (Eq. 2).

$$\frac{\partial(UH)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_{xx}U^2H)}{\partial x} + \frac{\partial(\beta_{xy}UVH)}{\partial y} = -gH \frac{\partial\eta}{\partial x} - g \frac{H^2}{2\rho_0} \frac{\partial\rho_0}{\partial x} + \frac{1}{\rho} [\tau_{xz}(\eta) - \tau_{xz}(-h)] + \frac{H}{\rho} \left[\frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial y} \right] \quad (\text{Eq. 1.1})$$

$$\frac{\partial(VH)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_{yx}VUH)}{\partial x} + \frac{\partial(\beta_{yy}V^2H)}{\partial y} = -gH \frac{\partial\eta}{\partial y} - \frac{gH^2}{2\rho_0} \frac{\partial\rho_0}{\partial y} + \frac{1}{\rho} [\tau_{yz}(\eta) - \tau_{yz}(-h)] + \frac{H}{\rho} \left[\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yy}}{\partial y} \right] \quad (\text{Eq. 1.2})$$

$$\frac{\partial(UH)}{\partial x} + \frac{\partial(VH)}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (\text{Eq. 2})$$

Donde:

- U : Velocidad del fluido en dirección x
- V : Velocidad del fluido en dirección y
- h : Superficie libre
- η : Altura en superficie libre
- H : $h + \eta$
- x : Coordenada horizontal
- y : Coordenada horizontal
- ρ_0 : Densidad media de la columna de agua

El modelo H2D para poder resolver las ecuaciones previamente descritas, emplea un algoritmo en diferencias finitas (Otero Díaz, 2005), en donde se requiere realizar el cambio pasando de un dominio continuo a un dominio discreto, generando una malla con elementos rectangulares de dimensiones (Δx , Δy).

3.4.2. Modelo numérico de derrame de sustancias químicas (TESEO)

La evolución del derrame químico se ha realizado con el modelo numérico TESEO, desarrollado por el Instituto de Hidráulica Ambiental de la Universidad de Cantabria (IHCantabria), y permite modelar el transporte y degradación de hidrocarburos y sustancias químicas. El modelo numérico TESEO está conformado por 2 módulos:

- ❖ Modelo de transporte: Es un modelo Lagrangiano bidimensional, el cual calcula el movimiento de las partículas, estas pueden ser hidrocarburos, objetos flotantes e

incluso personas en situación de naufragio. Este modelo deriva del modelo PICHl (A.J. Abascal et al., 2007) el cual desarrollado por la Universidad de Cantabria como un sistema de pronóstico operacional en respuesta del vertido del Prestige (Castanedo et al., 2009). El modelo Lagrangiano resuelve la ecuación:

$$\frac{dx_i}{dt} = U_a(x_i, t) + U_d(x_i, t) \quad (\text{Eq. 3})$$

Donde:

- x_i : Coordenada (x, y) de la partícula i
- U_a : Velocidad advectiva de la partícula en esa coordenada
- U_d : Velocidad difusiva

Para estos procesos, la “*velocidad advectiva (U_a)*” (Eq. 4) es calculada como la combinación del viento superficial y de las corrientes (A.J. Abascal et al., 2007; Ana J. Abascal et al., 2011).

$$U_a(t) = U_C + C_D U_V \quad (\text{Eq. 4})$$

Donde:

- U_C : Velocidad superficial de la corriente
- U_V : Velocidad del viento a 10m de la superficie
- C_D : Coeficiente de arrastre del viento

La ecuación previamente descrita se puede emplear para zonas en donde el efecto del oleaje es casi nulo (zonas de bahía, estuarios). Pero, en caso el oleaje sea relevante se le puede adicionar a la Eq. 4 la deriva de Stokes (Eq. 5).

$$U_a(t) = U_C + C_D U_V + C_H U_H \quad (\text{Eq. 5.1})$$

$$U_a(t) = U_C + C_D U_V + C_H \left(\frac{gH}{8C} \right) \quad (\text{Eq. 5.2})$$

Donde:

- U_H : Deriva de Stokes producto del oleaje
- C_H : Coeficiente de arrastre del oleaje
- g : Aceleración de la gravedad
- H : Altura de ola significativa
- C : Celeridad del tren de ondas

Asimismo, la “*velocidad turbulenta difusiva (U_d)*”, se calcula empleando el proceso de Monte Carlo (A.J. Abascal et al., 2007; Ana J. Abascal et al., 2011; Ana J. Abascal, Castanedo, Medina, & Liste, 2010; Ana J. Abascal et al., 2017), en donde dicha velocidad varía en un rango de $\pm U_d$, esto se considera proporcional a los coeficientes de difusión. En cada paso de tiempo, el movimiento de las partículas se define por la Eq. 6.

$$|\vec{U}_d| = \sqrt{\frac{6D}{\Delta t}} \quad (\text{Eq. 6})$$

Donde:

- D : Coeficiente de difusión comprendido en el rango de 1 – 100m²/s
- Δt : Variación temporal

Este primer modelo, fue calibrado y validado a escala regional y local, empleando para este proceso boyas de deriva las cuales fueron lanzadas en el Golfo de Vizcaya (Ana J. Abascal et al., 2011).

- ❖ Modelo de envejecimiento de la sustancia: El modelo de degradación, considera los procesos de esparcimiento, emulsión, evaporación y cambios en sus propiedades a escala regional y local (A.J. Abascal et al., 2007). Además, el modelo tiene en cuenta el balance de masa y la llegada del contaminante a la costa (A.J. Abascal et al., 2007).

En el desarrollo de este TFM, sólo se emplearon los procesos de spreading (esparcimiento) y evaporación, esta elección fue en función a las características de la sustancia de análisis. Por lo cual, a continuación detallamos dichos procesos:

El spreading es el esparcimiento horizontal que sigue la mancha o conjunto de partículas producto de la actuación de diversas fuerzas mecánicas, siendo estas la gravedad, la inercia, la tensión superficial y la viscosidad. El spreading considera las formulaciones de Fay (Eq. 7) y Lehr (Eq. 8):

$$A = K^3 \sqrt{\frac{V^2 g \Delta w t^{3/2}}{v_w^2}} \quad (\text{Eq. 7})$$

$$A = 2.27 (\Delta w V)^{2/3} t^{1/2} + 0.04 (\Delta w V_w^4)^{1/3} t \quad (\text{Eq. 8})$$

Donde:

- A : Área del derrame (m²)

- g : Aceleración de la gravedad (m/s^2)
- V : Volumen inicial de derrame (m^3)
- V_w : Viscosidad cinemática del agua (m^2/s)
- K : Constante empírica
- ΔW : Densidad relativa

La evaporación fue simulada empleando las formulaciones de Mackay y Matsugu (Eq. 9), estas formulaciones describen como el flujo de masa desde la superficie del agua a la atmósfera se incrementa en función de la presión de vapor, la temperatura, la intensidad de viento y el área de spreading.

$$E = A * K_m * \left(\frac{M_w * P_v}{R * T} \right) \quad (\text{Eq. 9})$$

Donde:

- E : Tasa de evaporación (kg/s)
- A : Área de evaporación (m^2)
- K_m : Coeficiente de transferencia de masa (m/s)
- M_w : Peso molecular de la sustancia ($kg/kmol$)
- P_v : Vapor de presión (Pa)
- R : Constante de gas (8314 J/kmol K)
- T : Temperatura del aire ($^{\circ}K$)

El coeficiente de transferencia de masa fue calculando empleando la Eq. 9.1.

$$K_m = 0.0292 * U^{7/9} * Z^{-1/9} * S_c^{-2/3} \quad (\text{Eq. 9.1})$$

Donde:

- U : Velocidad del viento a una altura de 10 m (m/s)
- Z : Diámetro de la superficie en dirección al viento (m)
- S_c : Número laminar de Schmidt

El número laminar de Schmidt, es una unidad de ratio calculada de la siguiente forma (Eq. 9.2):

$$S_c = \frac{\nu}{D_m} \quad (\text{Eq. 9.2})$$

Donde:

- ν : Viscosidad cinemática del aire, se asume que es $1.5 \cdot 10^{-5} m^2/s$
- D_m : Difusividad molecular del químico (m^2/s)

Para el cálculo de la Difusividad molecular del químico en el aire, se emplea la Ley de Graham (Eq. 9.3):

$$D_m = D_{H_2O} * \left(\frac{M_{W_{H_2O}}}{M_{W_{Químico}}} \right) \quad (\text{Eq. 9.3})$$

Donde:

- D_{H_2O} : Difusividad molecular del agua ($2.4 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ a 8°C)
- $M_{W_{(H_2O)}}$: Peso molecular del agua (18 kg/kmol)
- $M_{W_{(químico)}}$: Peso molecular del químico (kg/kmol)

3.5. METODOLOGÍA

Para la realización del presente TFM se generó una nueva metodología de análisis y procesamiento de los datos meteo-oceanográficos y de caudales. Esta metodología estuvo compuesta por 7 principales etapas, la **Fig. 5.1** detalla el flujo metodológico de forma sintetizada.

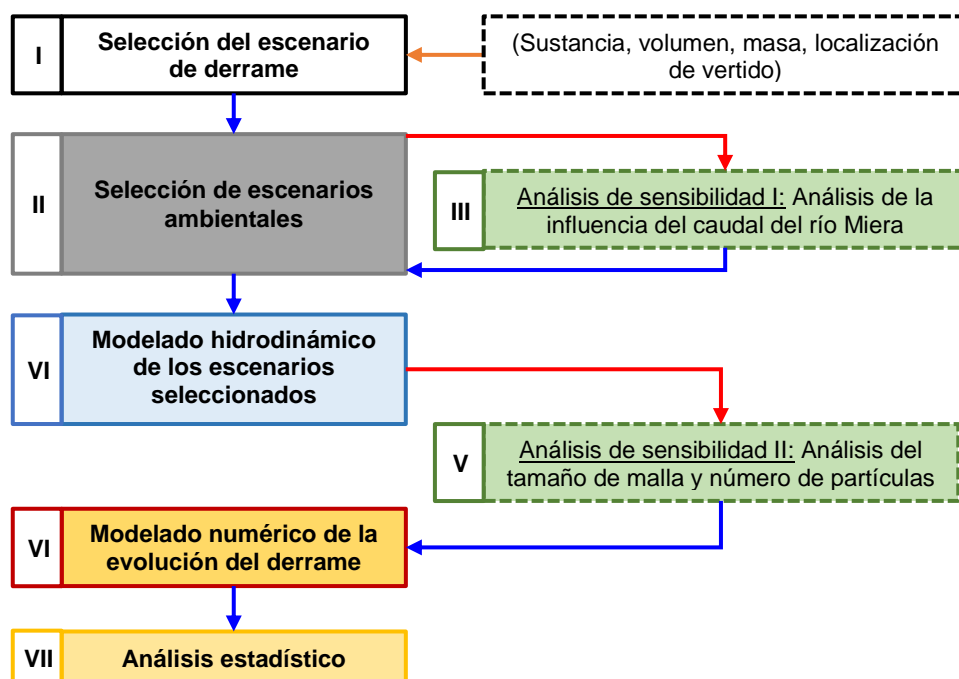


Fig. 5.1. Proceso metodológico sintetizado empleado para la determinación de la probabilidad de contaminación del Ciclohexano.

Mientras que la **Fig. 5.2**, muestra el flujo metodológico a detalle siguiendo paso a paso cada proceso realizado, así como las ecuaciones empleadas para la obtención de los escenarios de simulación.

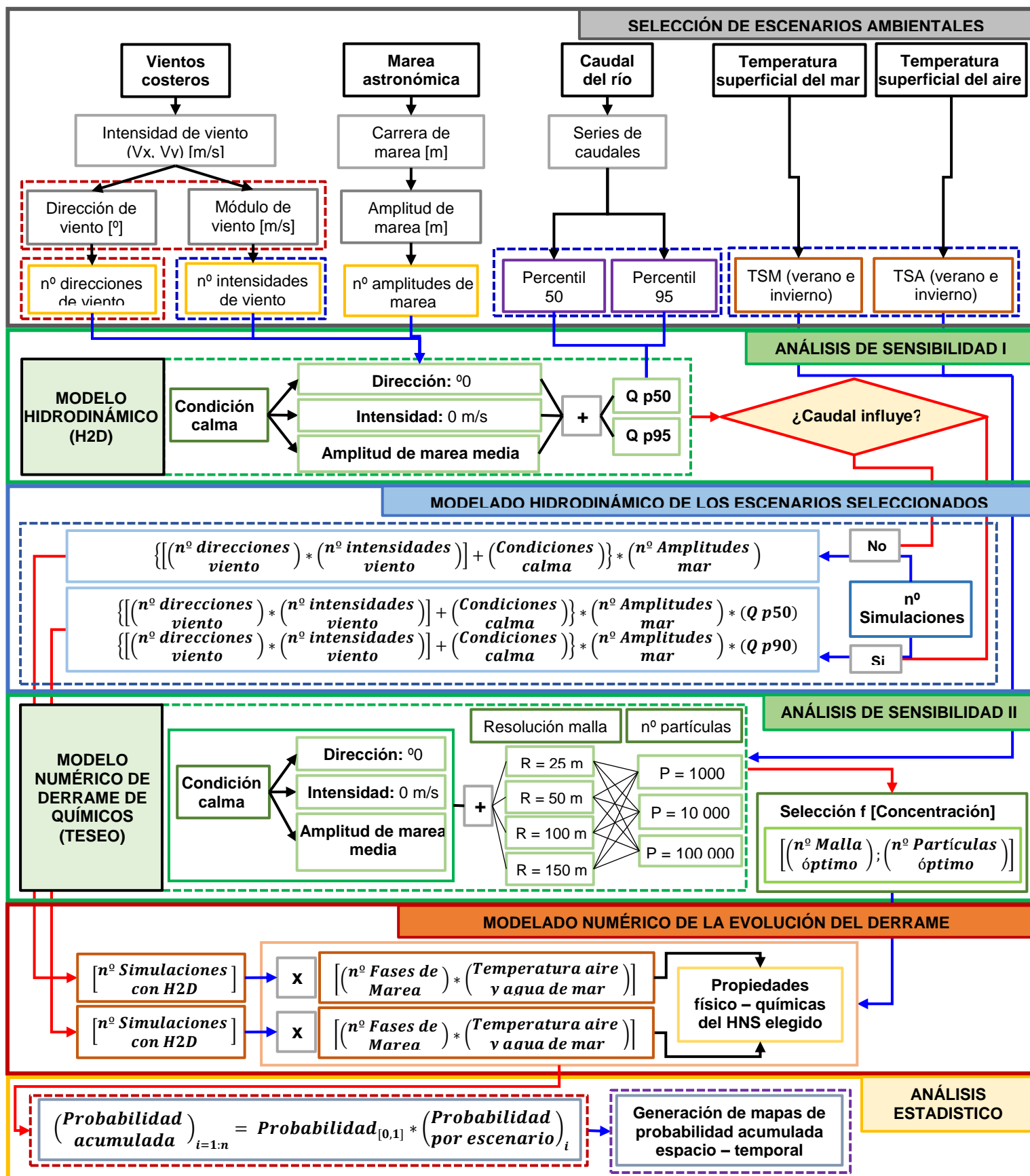


Fig. 5.2. Proceso metodológico detallado empleado para la determinación de la probabilidad de contaminación del Ciclohexano. Los cuadros punteados: rojos, son los scripts generados en Matlab; azules, son los script generado en R; y morado, representa al análisis en ArcGIS.

3.5.1. Etapa I: Selección del escenario de derrame

Se detalla la localización espacial del vertido al interior de la bahía, indicando las principales características del ciclohexano así como la masa y el volumen de vertido.

3.5.2. Etapa II: Selección de escenarios ambientales

Se realizó una serie de procesamientos a los datos brutos detallados en la [Tabla 1](#), antes de poder ser empleados en los modelos numéricos.

Vientos costeros: Para el procesamiento de los vientos costeros (V_x , V_y) se creó un script en Matlab, el cual permitió obtener los datos de dirección de viento ($^\circ$) y el módulo de la intensidad de viento (m/s). Una vez obtenido estos datos de viento, se aplicaron dos procesos de selección para determinar el número de direcciones viento y el número de intensidades de viento óptimos.

❖ Selección del nº de direcciones de viento costero: Se creó un script en Matlab para generar una rosa de viento con la finalidad de poder determinar de visualmente las direcciones con los vientos más predominantes. En base a los ángulos de dirección de cada una de las regiones se realizó un agrupamiento de direcciones de viento obteniendo las direcciones finales de viento.

❖ Selección del nº de intensidades de viento costero: Para determinar la cantidad de escenarios de intensidad de vientos costeros por región, se empleó la metodología desarrollada por (Rodríguez Benítez, Álvarez Díaz, García Gómez, & García-Alba, 2018), para la cual se siguieron los siguientes pasos:

- a. Generación de gráficas de probabilidad acumulada por dirección (región).
 - En este análisis no se consideraron los valores de la región de calma, por lo cual las gráficas engloban valores de intensidad de viento de 2 m/s en adelante.
 - Estas gráficas fueron divididas empleando como puntos de corte los valores medios de percentiles, en donde: para 2 escenarios se emplearon los percentiles de 25 y 75 siendo el punto de corte el percentil 50; para 3 escenarios se emplearon los percentiles de 16.67, 50 y 83.33 siendo los puntos de corte los percentiles 33.33 y 66.66, y así sucesivamente para 10 escenarios en donde se emplearon 10 valores de percentiles y 9 puntos de corte.

- b. Empleamos los valores de percentiles de cada escenario, con la finalidad de obtener series reconstruidas las cuales fueron comparadas con la serie original. A medida que se incrementa el número de escenarios la diferencia entre las serie original y reconstruida se reduce.
- c. Empleando la ecuación establecida por (Rodríguez Benítez et al., 2018) (Eq. 10) se determinó el coeficiente de eficiencia (CE) para cada región de vientos, en donde un valor de $CE < 0.5$ es pobre, CE entre 0.6 a 0.8 es bueno y valores de $CE > 0.8$ es excelente. Mediante este proceso se determinó el número de intensidades de viento óptimos que se deben considerar en cada dirección (región) de viento.

$$CE = 1 - \frac{\sum (R_i - S_i)^2}{\sum (R_i - \bar{R})^2} \quad (\text{Eq. 10})$$

Donde:

- R_i : Elementos de la serie de tiempo real
- S_i : Elementos de la serie de tiempo reconstruida
- \bar{R} : Promedio de los elementos de la serie de tiempo real

Marea astronómica: Empleando la serie de carrera de marea (1970 – 2008) se empleó un script R para determinar los valores de percentil 10, 30, 50, 70 y 90; y generar la distribución de probabilidad acumulada.

Caudal del río Miera: Empleando la serie de caudales del río Miera (1970 – 2008) se empleó un script R para determinar los valores de percentil 50 y 95.

Temperatura superficial del aire: Empleando la serie de temperaturas (1997 – 2019) se empleó un script R para determinar los valores de temperatura en verano e invierno.

Temperatura superficial del agua: Empleando la serie de temperatura (2005 – 2019) se empleó un script R para seleccionar solo los valores de temperatura del agua superficial, siguiendo dos criterios:

- Rango de profundidad: 0 – 1 metro de profundidad.
- Promedio de valores de cada estación (verano e invierno)

3.5.3. Etapa III: Análisis de sensibilidad I – Análisis de la influencia del caudal del río Miera

Se emplearon dos valores de caudales, un valor medio y un valor extremo. Con la finalidad de determinar si en épocas de gran avenida se aprecia alguna alteración en las velocidades de corrientes, que no pueda ser visibles bajo condiciones normales de caudal. Para lo cual se configuró el modelo hidrodinámico H2D, introduciendo entre todos los parámetros, los valores de caudal.

3.5.4. Etapa IV: Modelado hidrodinámico de los escenarios seleccionados

Una vez determinado, si el caudal del río Miera presenta o no una influencia sobre la hidrodinámica interna de la bahía, se procede a la selección del número de escenarios a simular con el modelo hidrodinámico H2D. Para lo cual, se emplearan dos ecuaciones: Eq. 11, si el caudal no representa alguna alteración interna, o la Eq. 12, si el caudal presenta una moderada o fuerte alteración al interior de la bahía.

$$\left[\begin{matrix} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{H2D} \end{matrix} \right] = \left\{ \left[\left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{direcciones} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{intensidades} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) \right] + \left(\begin{matrix} \text{Condiciones} \\ \text{calma} \end{matrix} \right) \right\} * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{Amplitudes} \\ \text{mar} \end{matrix} \right) \quad (\text{Eq. 11})$$

$$\left[\begin{matrix} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{H2D} \end{matrix} \right] = \left\{ \left[\left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{direcciones} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{intensidades} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) \right] + \left(\begin{matrix} \text{Condiciones} \\ \text{calma} \end{matrix} \right) \right\} * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{Amplitudes} \\ \text{mar} \end{matrix} \right) * \left(\frac{Q}{p_{50}} \right) \quad (\text{Eq. 12.1})$$

$$\left[\begin{matrix} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{H2D} \end{matrix} \right] = \left\{ \left[\left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{direcciones} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{intensidades} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) \right] + \left(\begin{matrix} \text{Condiciones} \\ \text{calma} \end{matrix} \right) \right\} * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{Amplitudes} \\ \text{mar} \end{matrix} \right) * \left(\frac{Q}{p_{95}} \right) \quad (\text{Eq. 12.2})$$

Una vez obtenido el número de escenarios de simulación, se realiza la configuración del modelo así como la selección de los datos de entrada, el único cambio que se realiza es el de activar o desactivar el punto correspondiente al caudal del río Miera en función de los resultados que se puedan obtener del análisis de sensibilidad.

3.5.5. Etapa V: Análisis de sensibilidad II – Análisis del tamaño de malla y el número de partículas

Antes de poder lanzar las simulaciones con el modelo numérico TESEO, se realizó un análisis de sensibilidad para lo cual se empleó una condición de calma y diferentes

tamaños de malla y número de partículas, con la finalidad de poder determinar la combinación óptima.

La configuración del modelo numérico, se basó en la introducción de los diversos parámetros físicos, las características de la sustancia química, así como la variación del número de partículas y archivos de malla para cada análisis.

El número de malla y de partículas óptimo se determinará analizando la variación temporal de la concentración en dos puntos: (i) el centro de gravedad del punto de vertido y (ii) el centro de gravedad de las partículas antes de que se logre su evaporación total. Asimismo, influirá en esta selección del gasto computacional que se emplea en cada simulación.

3.5.6. Etapa VI: Modelado numérico de la evolución del derrame

Una vez seleccionada el tamaño de malla y número de partículas óptimo, se procede a la selección del número de escenarios a simular con el modelo, para lo cual se emplea la siguiente ecuación (Eq. 13).

$$\left[\begin{matrix} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{TESEO} \end{matrix} \right] = \left[\begin{matrix} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{H2D} \end{matrix} \right] * \left[\left(n^{\circ} \text{ Fases de} \right) * \left(\begin{matrix} \text{Temperatura aire} \\ \text{y agua de mar} \end{matrix} \right) \right] \quad (\text{Eq. 13})$$

El modelo numérico TESEO siguió la misma configuración empleada previamente, el único cambio que se realiza es al momento de configurar el número de partículas y tamaño de malla obtenidos del análisis de sensibilidad.

3.5.7. Etapa VII: Análisis estadístico

Para el análisis estadístico de los resultados, se empleó un script en Matlab con la finalidad de poder determinar la probabilidad acumulada espacio – temporal de contaminación del ciclohexano en las estaciones de verano e invierno.

En primer lugar, se determinó la probabilidad por escenario.

❖ Probabilidad por escenario: A partir de la selección de datos empleados (apartado 3.5.1), se empleó la Eq. 14 para calcular el valor de probabilidad de ocurrencia, el cual va a variar en cada escenario de simulación (**Anexo 1**). Cabe mencionar que

para la realización de este TFM, los valores de probabilidad de ocurrencia por escenario será el mismo en verano e invierno.

$$\left(\begin{matrix} \text{Probabilidad} \\ \text{por escenario} \end{matrix} \right)_{i=1:n} = \sum_{i=1}^n (P_{\text{fases de marea (i)}} * P_{\text{vientos costeros (i)}} * P_{\text{amplitud de marea (i)}}) \quad (\text{Eq. 14})$$

En segundo lugar, se determinó la probabilidad [0, 1] de cada escenario.

❖ Probabilidad [0, 1]: A partir de cada escenario simulado con el modelo numérico TESEO, se obtiene un resultado espacio – temporal de probabilidades de llegada del ciclohexano. Para lo cual hay que entender lo siguiente:

- En cada paso de tiempo, desde la hora 0 hasta la hora 24, se obtendrá un mapa de probabilidad [0, 1].
- Se estable como probabilidad de contaminación, a la llegada de al menos 1 partícula.

En tercer lugar, se calculó la probabilidad acumulada espacio temporal (Eq. 15)

$$\left(\begin{matrix} \text{Probabilidad} \\ \text{acumulada} \\ \text{Espacio – Temporal} \end{matrix} \right)_{i=1:n} = \text{Probabilidad}_{[0,1]} * \left(\begin{matrix} \text{Probabilidad} \\ \text{por escenario} \end{matrix} \right)_i \quad (\text{Eq. 15})$$

Una vez determinada la probabilidad acumulada de verano e invierno, estos datos fueron cargados al ArcGIS en donde se generaron los mapas de probabilidad de contaminación.

CAPÍTULO IV: RESULTADOS

4.1. SELECCIÓN DEL ESCENARIO DE DERRAME

El presente TFM se realizó bajo el supuesto derrame accidental al interior de la bahía, en donde el punto de vertido estuvo localizado en las coordenadas -3.797° W y 43.445° N, sobre el pantalán de Dynasol, muy próximo al canal de navegación (Fig. 6).



Fig. 6. Ubicación espacial del punto de vertido al interior de la bahía de Santander.

El volumen de vertido empleado fue de 15m^3 , este valor fue determinado empleando los criterios para la valoración relacionadas a la magnitud del episodio contaminante de la ROM 5.1-13 (Puertos del Estado, 2013), debido a que la potencial extensión afectada es mayor a 19 km^2 .

Como fue comentado previamente, la sustancia de análisis seleccionada fue el ciclohexano y tiene las siguientes propiedades físico – químicas (Braskem, 2017; Chem-Lab, 2018; Gad, 2014; Luttrell & Lyiza, 2010):

- Pero molecular: 84.16 g/mol
- Velocidad de evaporación relativa: 6
- Presión de vapor 12,6656 KPa
- Temperatura de presión de vapor: 25°C
- Densidad: 778 kg/m³
- Temperatura de densidad: 20°C
- Viscosidad cinemática: 1.26 E⁻⁰⁶ cSt
- Temperatura de la viscosidad cinemática: 20°C
- Soluble en agua: No
- Volatilización: 3 horas a 3 días y medio
- Sustancia evaporante

4.2. SELECCIÓN DE ESCENARIOS AMBIENTALES

El punto de partida de cualquier simulación de evolución de un derrame en el medio marino, es la determinación de las variables de dinámica atmósfera (viento) y mar (oleaje y corrientes) que serán los forzamientos de entrada que necesita un modelo numérico para que resuelva el transporte y degradación de sustancias químicas. En general, el transporte de un vertido en mar abierto está muy condicionado por el efecto del viento. Cerca de la costa, adquiere relevancia el efecto de las corrientes y en zonas de rompientes de playas, también el efecto del oleaje.

Como se mostrará a continuación, en la bahía de Santander al tratarse de un estuario y dadas sus condiciones, las dinámicas dominantes son la marea astronómica y el viento, y en momentos de avenida, el río Miera. El oleaje queda descartado debido a que su efecto es más relevante en zonas de playa, pero no cuando se analiza grandes volúmenes de agua como es la bahía de Santander.

En este apartado se seleccionarán el número de direcciones e intensidades de viento, número de fases de marea y número de amplitudes de marea.

4.2.1. Vientos costeros

Se emplearon bases de datos de reanálisis SeaWind – NCEP, que proporcionaron la velocidad de viento (V_x , V_y), estos datos tuvieron una resolución horaria, pero creó un script en Matlab para promediar los datos iniciales y obtener los valores medios diarios, además se determinaron los módulos y direcciones de viento con respecto al norte.

Los escenarios cálculo de viento han sido seleccionados teniendo en cuenta tanto la variabilidad en la dirección como en la intensidad.

4.2.1.1. Direcciones de viento

Empleando los datos de direcciones de viento se generó una rosa de vientos con 16 regiones (direcciones) de vientos (**Fig. 7.a**), el cual nos permitió identificar las regiones más predominantes y los ángulos medios de cada región (**Tabla 2**). Pero trabajar con todas estas regiones de viento resultaría muy complicado y tomaría mucho tiempo de análisis, por lo tanto se agruparon las regiones de viento, pasando de 16 a 8 regiones finales (**Fig. 7.b**), siendo estas nuevas regiones las más representativas al interior de la bahía. Por lo tanto, el *número de direcciones de viento final fue 8* (**Tabla 3**).

Tabla 2. Reagrupamiento de ángulos de la rosa de viento.

Nº DIR	AGRUPACIÓN DE ÁNGULOS	ÁNGULO	Nº DIR	AGRUPACIÓN DE ÁNGULOS	ÁNGULO MEDIO
1	348.75° - 11.25°	0.00°	1	348.75° - 33.75°	11.25°
2	11.25° - 33.75°	22.50°	2	33.75° - 78.75°	56.25°
3	33.75° - 56.75°	45.00°	3	78.75° - 123.75°	101.25°
4	56.75° - 78.75°	67.50°	4	123.75° - 168.75°	146.25°
5	78.75° - 101.25°	90.00°	5	168.75° - 213.75°	191.25°
6	101.25° - 123.75°	112.50°	6	213.75° - 258.75°	236.25°
7	123.75° - 146.25°	135.00°	7	258.75° - 303.75°	281.25°
8	146.25° - 168.75°	157.50°	8	303.75° - 348.75°	326.25°
9	168.75° - 191.25°	180.00°			
10	191.25° - 213.75°	202.50°			
11	213.75° - 236.25°	225.00°			
12	236.25° - 258.75°	247.50°			
13	258.75° - 281.25°	270.00°			
14	281.25° - 303.75°	292.50°			
15	303.75° - 326.25°	315.00°			
16	326.25° - 348.75°	337.50°			

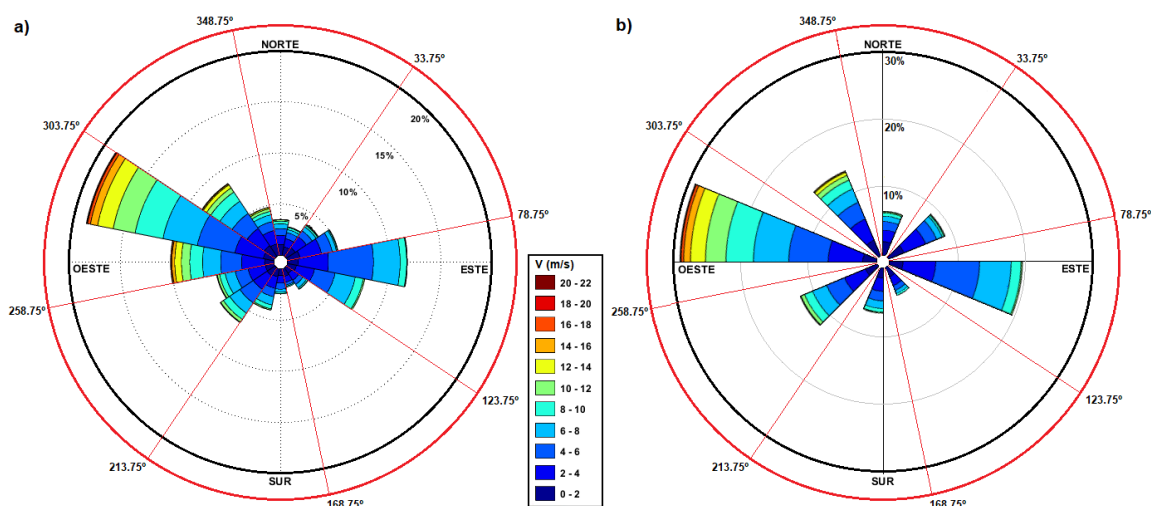


Fig. 7. Rosa de vientos con (a) 16 direcciones y con (8) direcciones de vientos, determinado para toda la bahía de Santander.

4.2.1.2. Intensidades de viento

Empleando la metodología explicada en el apartado 3.5.1, todos los datos de vientos de las 8 regiones fueron pasados a una distribución de densidad, con la finalidad de poder identificar la región de calma y extraerla de todas las regiones de viento (**Fig. 8**). Cabe mencionar que diferentes autores asignan a la región de calma valores de viento de 0 m/s (Salami, Ajavon, Kodjo, & Bedja, 2013), de 0.2 a 0.5 m/s (Jeong, Park, Hwang, Kim, & Han, 2013) y de 0 a 2 m/s (Armanfar, Goharnejad, Niri, & Perrie, 2019), pero en esta investigación la región de calma estará definida por todos los vientos < 2 m/s.

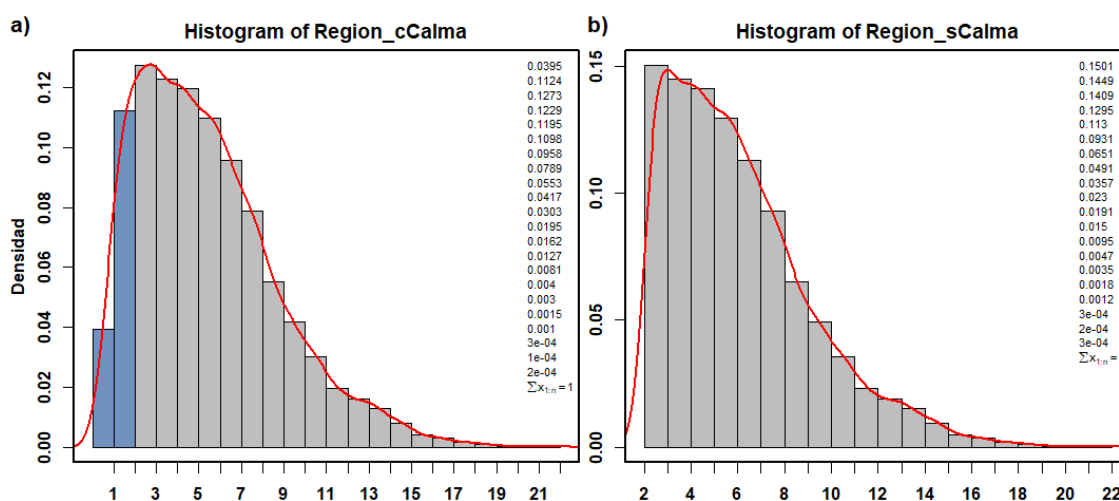


Fig. 8. Histogramas de intensidad de viento de las 8 regiones, (a) con valores de calma y (b) sin valores de calma en el interior de la bahía de Santander.

Mediante la obtención de la probabilidad acumulada en cada región de viento, sin los valores de calma (**Fig. 9.a**), se seleccionaron los valores de percentil (puntos rojos) para generar la serie reconstruida, la cual fue comparada con la serie original de vientos existente en cada región (**Fig. 9.b**). Cabe mencionar que este proceso fue replicado en cada dirección (región) de viento.

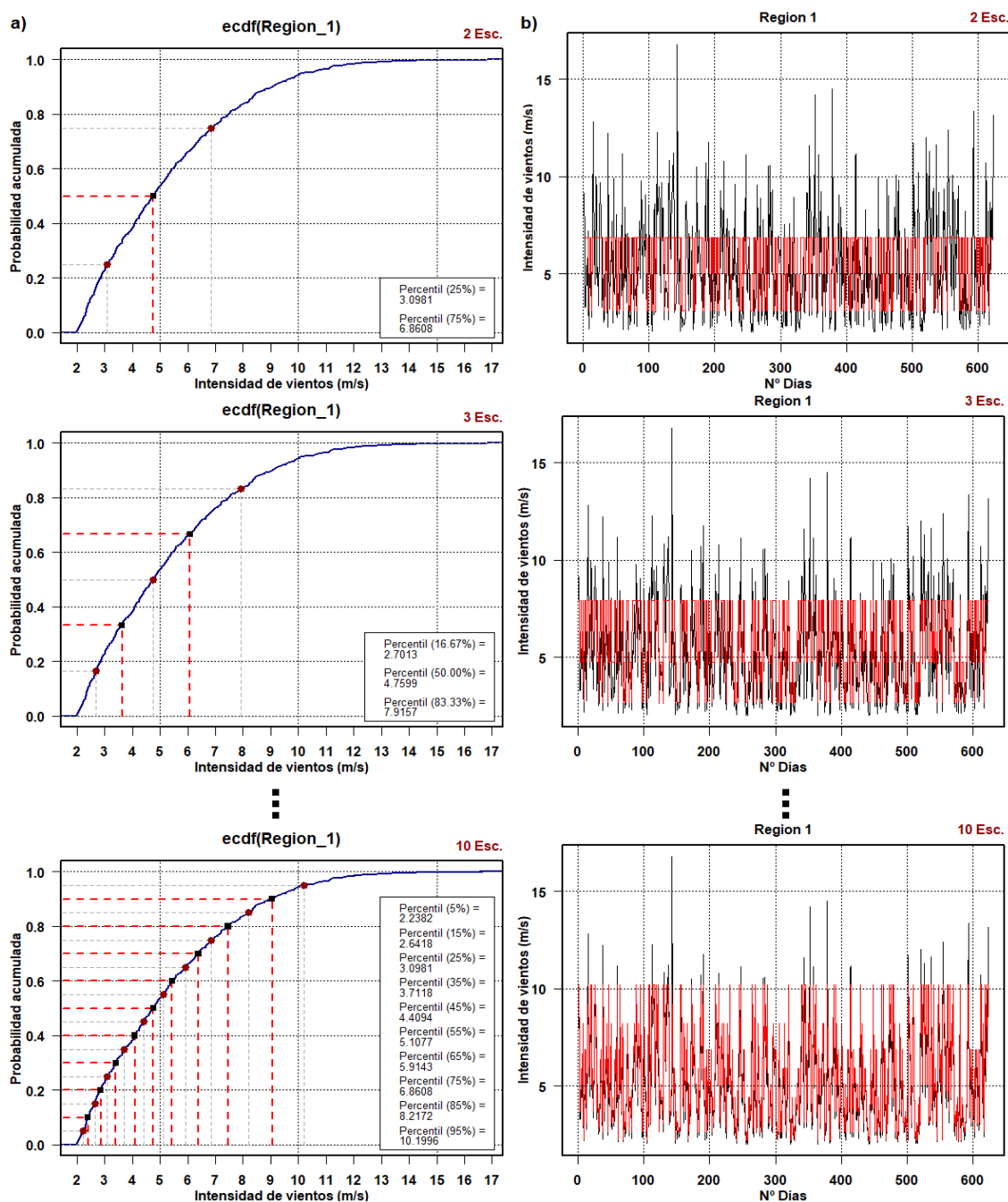


Fig. 9. (a) Gráficas de probabilidad acumulada de la región 1, con los puntos de corte (puntos negros) y los valores de percentiles (puntos rojos) en cada escenario (escenario: 2, 3, 4, 5 y 10); y (b) gráficas comparativas de las series de tiempo real (línea negra) y serie reconstruida (línea roja) de la región 1.

Empleando la Eq. 10, se determinó el coeficiente de eficiencia de cada región de vientos. Asimismo, se generaron las gráficas de coeficiente de eficiencia (CE) para cada región de vientos, determinando el número de escenarios óptimos que se deben considerar en cada región de viento (**Fig. 10**).

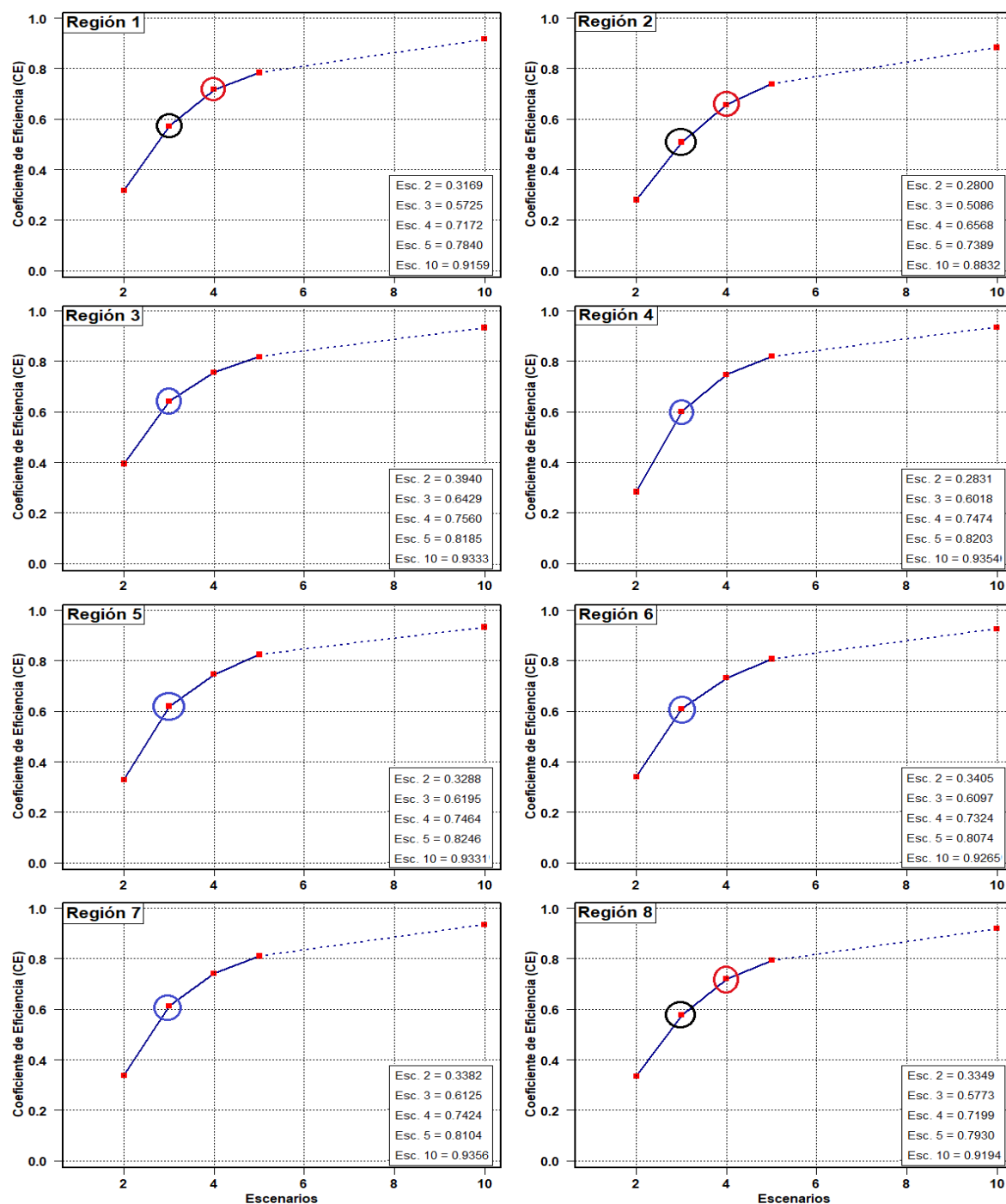


Fig. 10. Series de coeficiente de eficiencia (CE) para cada dirección (región) de viento costero.

En base a los resultados que se muestran en la **Fig. 10**, se determina que a medida que se incrementa el número de escenarios de cálculo dentro de cada región de viento se incrementa de forma directa el coeficiente de eficiencia. Como se observa, con 10 escenarios de cálculo el valor del coeficiente de eficiencia es de categoría “excelente” (superior a 0.9), pero para el desarrollo de este TFM sólo se emplearon valores de coeficiente eficiencia cercanos a la categoría “bueno” (cercano a 0.6) con la finalidad de reducir la cantidad de escenarios de simulación.

Por lo cual, se determina que en las regiones 1, 2 y 8 el número de escenarios óptimos serán 4 (círculos rojos), presentando valores de CE de categoría bueno (superior a 0.6). Mientras que para el resto de regiones (3, 4, 5, 6 y 7) el número de escenarios óptimos serán 3 (círculos azules) con valores de CE de categoría bueno (ligeramente arriba de 0.6). Pero, debido a limitaciones de tiempo de simulación y coste computacional, se decidió emplear 3 escenarios de cálculo (círculo negro) en las regiones 1, 2 y 8. Por lo tanto, *el número de intensidades de viento final para cada dirección fue 3* (**Tabla 3**).

Tabla 3. Número de direcciones e intensidades de viento costero.

Nº REGIÓN	DIRECCIONES DE VIENTO	INTENSIDADES DE VIENTO		
		p 16.67	p 50	p 83.33
Región 1	11.25°	2.70 m/s	4.76 m/s	7.92 m/s
Región 2	56.25°	2.52 m/s	3.90 m/s	6.52 m/s
Región 3	101.25°	3.24 m/s	5.22 m/s	7.30 m/s
Región 4	146.25°	2.62 m/s	4.18 m/s	7.00 m/s
Región 5	191.25°	2.86 m/s	4.78 m/s	7.67 m/s
Región 6	236.25°	3.04 m/s	5.24 m/s	8.29 m/s
Región 7	281.25°	3.83 m/s	6.94 m/s	11.39 m/s
Región 8	326.25°	3.04 m/s	5.60 m/s	9.46 m/s
Región calma	0°		0 m/s	

4.2.2. Marea astronómica

Se emplearon bases de datos de DOW SeaWind – NCEP, del cual se obtuvieron las carreras de marea, al igual que el caso de vientos estos datos tuvieron una resolución horaria, pero creó un script en Matlab para promediar los datos iniciales y obtener los valores medios diarios.

La selección de los escenarios de marea astronómica, se realizó en función de la amplitud y las fases de marea.

4.2.2.1. Amplitud de marea

Para seleccionar las amplitudes de marea se utilizaron los datos de carrera de marea comprendidos desde 1970 hasta el 2008. Empleando estos datos se generó la función de probabilidad para poder visualizar los niveles de mayor y menor probabilidad de ocurrencia.

Para poder caracterizar adecuadamente los niveles de carrera de marea se seleccionaron 5 percentiles (10, 30, 50, 70 y 90) (Fig. 11). Asimismo, los datos de amplitud de marea fueron obtenidos de dividir entre 2 a los valores de carrera de marea. Por lo cual, el número de amplitudes de marea fue 5 (Tabla 4).

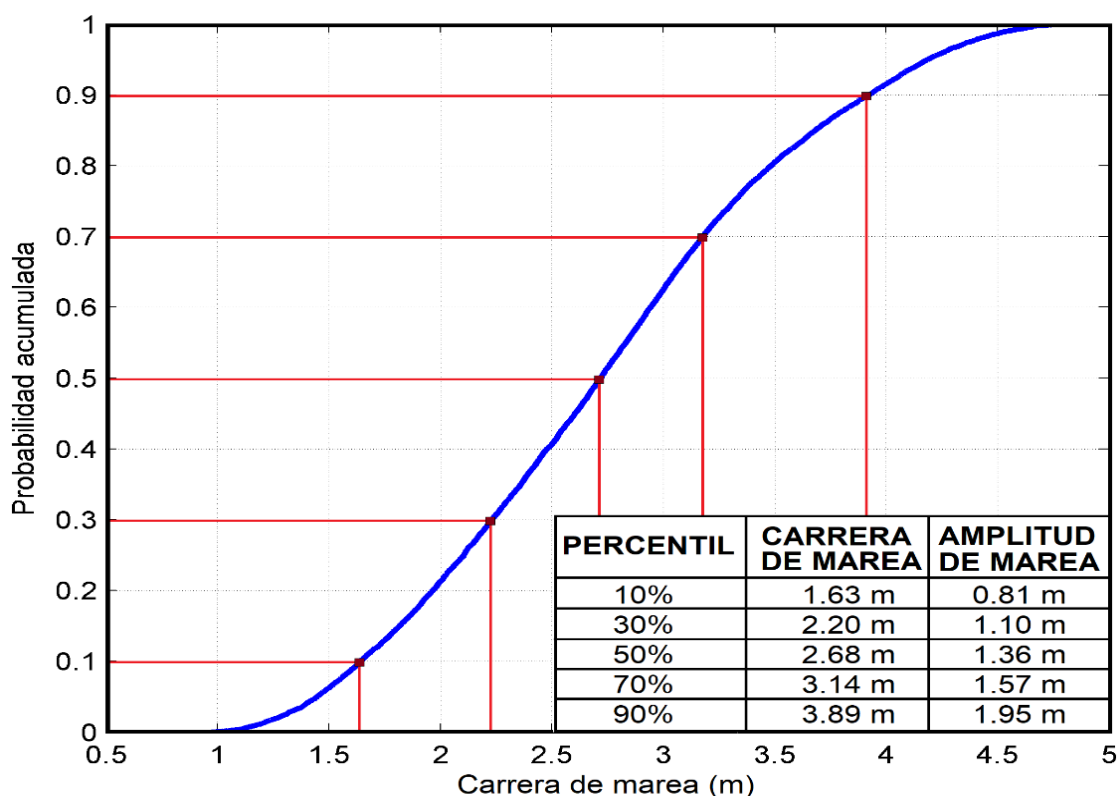


Fig. 11. Probabilidad acumulada de las carreras de marea registradas al interior de la bahía de Santander.

4.2.2.2. Fases de marea

Debido a la hidrodinámica que existe al interior de la bahía, se consideró emplear 4 fases de marea (pleamar, media vaciante, bajamar y media llenante) (Tabla 4), con la

finalidad de poder analizar el comportamiento del ciclohexano bajo diferentes condiciones oceanográficas.

Tabla 4. Número de amplitudes y fases de marea.

Nº REGIÓN	AMPLITUDES DE MAREA					FASES DE MAREA *			
Región 1	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 2	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 3	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 4	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 5	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 6	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 7	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4
Región 8	0.8125	1.1	1.36	1.57	1.95	F1	F2	F3	F4

* F1 (pleamar), F2 (media vaciante), F3 (bajamar) y F4 (media llenante).

4.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD I – ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL CAUDAL DEL RÍO MIERA

4.3.1. Caracterización del caudal del río Miera

En la bahía de Santander el principal aportador de agua dulce es el río Miera, por lo cual es importante analizar si los niveles de caudal que se obtienen de este río afectan en la hidrodinámica interna de la bahía de Santander, específicamente determinar una posible alteración próxima al punto de vertido.

Bajo este objetivo, se emplearon los registros de caudal desarrollado por el IH Cantabria (“Actualización del Estudio de Recursos Hídricos de los ríos de la vertiente norte de Cantabria 2008”), siendo el periodo de los desde 1970 hasta el 2008, con una frecuencia diaria.

Empleando la serie global de datos de caudal se generó la probabilidad acumulada (**Fig. 12**), del cual se determinó el caudal medio (percentil 50) de 3.7 m³/s y un caudal extremo o de avenida (percentil 95) de 36.89 m³/s. El empleo de dos valores de caudal fue para determinar si en épocas de gran avenida se apreciaría alguna alteración en las velocidades de corrientes, que no pueda ser visibles bajo condiciones normales de caudal.

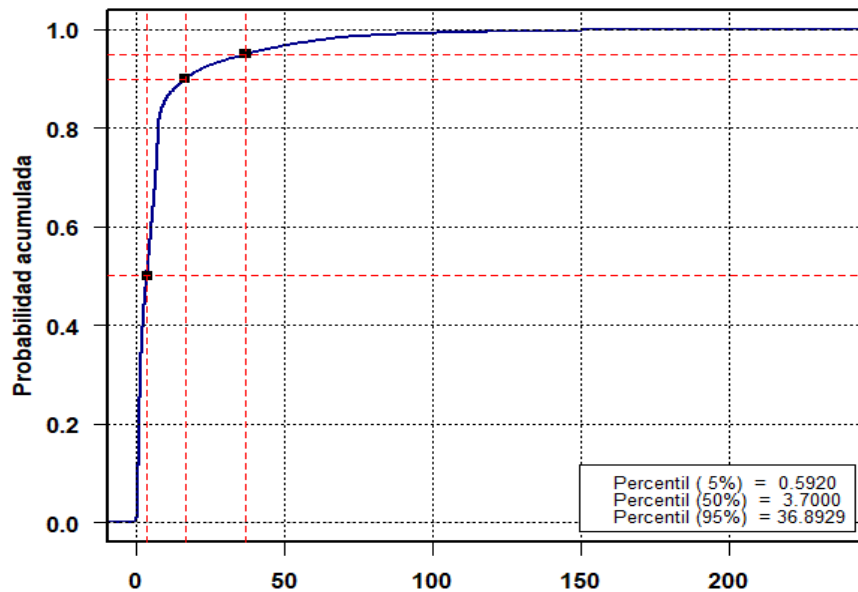


Fig. 12. Probabilidad acumulada de la serie histórica de caudales del río Miera

4.3.2. Configuración del modelo hidrodinámico H2D

Como se ha comentado anteriormente, la hidrodinámica al interior de la bahía de Santander fue calculada empleando el modelo hidrodinámico H2D. Para el análisis de sensibilidad del efecto del río Miera, el modelo fue forzado con las siguientes condiciones:

❖ Parámetros de ejecución:

- Paso temporal: 5 seg.
- Tiempo total de ejecución: 48 horas
- Descarta la inundación y fricción de contornos
- Valor de la rugosidad k: 0.2
- Valor del Eddy constante: 7
- Efecto Coriolis: No
- Coeficiente de arrastre por viento: 0.0026
- Grabado de datos a partir de las 24 horas
- Intervalo de grabado de datos: 900s

La malla empleada en estas simulaciones estuvo constituida por 67x80 elementos (celdas) con una resolución de 150mx150m. Además, se emplea como escenario de simulación a la región de calma, en el cual se establecieron las siguientes condiciones de partida:

- Velocidad de viento: 0 m/s
- Dirección de viento: 0°
- Amplitud de marea: 1.36 m
- Caudal del río Mierda: 3.7 m³/s y 36.89 m³/s

Para analizar los efectos del caudal del río se realizaron 3 simulaciones de las corrientes, con y sin influencia del caudal del río Miera y variando la amplitud de marea.

- Simulación 1: Empleando una amplitud de 1.36m y sin influencia del caudal.
- Simulación 2: Empleando una amplitud de 1.36m y un caudal de 3.7m³/s.
- Simulación 3: Empleando una amplitud de 1.36m y un caudal de 36.89m³/s.

4.3.3. Modelado hidrodinámico

De los resultados obtenidos en estas simulaciones, se analizaron todos los pasos de tiempo (desde la hora 24h hasta la hora 48) y se determinó que en el paso de tiempo 33 se registran las mayores diferencias de caudal. Por lo cual se eligió la hora 33 y sus intervalos de tiempo con un paso de 15min (33.00, 33.25h, 33.50h y 33.75h) para analizar las variaciones sobre la hidrodinámica al interior de la bahía.

Empleando un caudal medio ($Q = 3.7 \text{ m}^3/\text{s}$), se determinó que espacialmente los mayores niveles de velocidad de corrientes estuvieron localizados frente a Punta Cotrajón (Fig. 13). Esto es debido a que en esta zona existe un dique el cual actúa como cuello de botella, incrementando la velocidad de salida del agua.

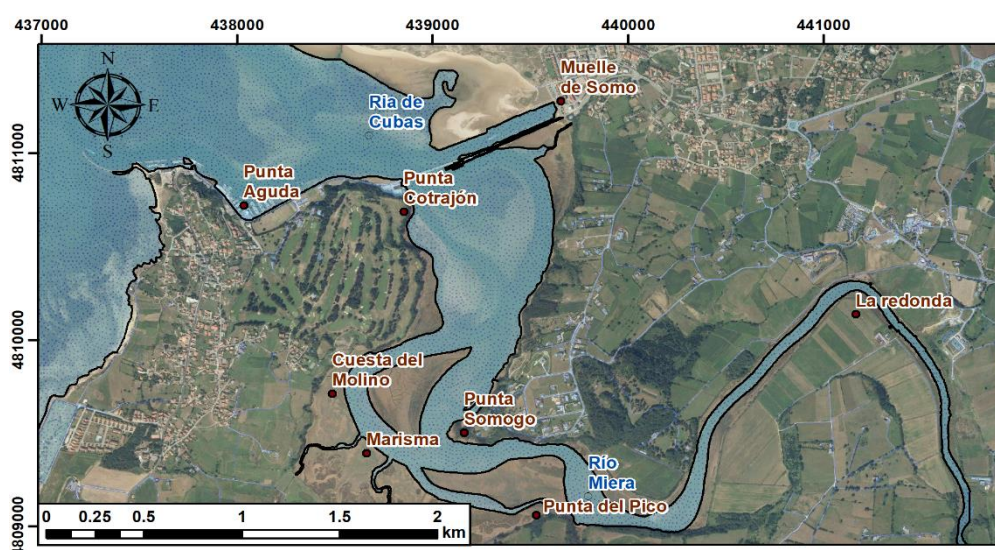


Fig. 13. Tramo final del río Miera (ría de Cubas) antes de desembocar en la bahía de Santander.

Mientras que del análisis temporal, se determinó que las velocidades de corrientes en cada paso de tiempo, se determinó que en la hora 33.25h se obtuvo la máxima diferencia de velocidad de corrientes, de 0.175 m/s. Mientras que en el paso de tiempo de 33.00h se determinó la menor diferencia de velocidad de corrientes, de 0.012 m/s. Asimismo, en los otros dos pasos de tiempo (33.50h y 33.75h) las diferencias de caudal fueron de 0.020 m/s y de 0.025 m/s, respectivamente (Fig. 14).

Por otro lado, empleando un caudal extremo ($Q = 36.89 \text{ m}^3/\text{s}$) se determinó espacialmente que los mayores niveles de velocidad de corrientes estuvieron localizados en dos zonas: (i) en Punta Cotrajón, debido a la existencia de un dique; y (ii) desde La redonda hasta Punta del Pico, debido que es la sección más angosta, actuando como un cuello de botella (Fig. 13).

A diferencia del primer análisis temporal, empleando este nivel de caudal se determinó que en la hora 33.50h y 33.75h se obtuvieron la máxima diferencia de velocidad de corrientes, de 0.134 m/s. Mientras que en el paso de tiempo de 33.00h se determinó la menor diferencia de velocidad de corrientes, de 0.121 m/s (Fig. 15).

Basados en estos resultados, se concluyó que la influencia que ejerce el caudal del río Miera sobre la hidrodinámica de la bahía de Santander es muy reducida, siendo el rango de oscilación de la diferencia de velocidades en cada uno de los casos de $\pm 0.15 \text{ m/s}$. Asimismo, estos pequeños efectos de incremento de la corriente, se llevaron a cabo en la desembocadura del río Miera y no en zonas próximas al punto de vertido. Por lo tanto, se descartó emplear los niveles de caudal en las futuras simulaciones.

4.4. MODELADO HIDRODINÁMICO DE LOS ESCENARIOS SELECCIONADOS

Una vez seleccionados los escenarios de viento y de marea astronómica, y descartado los efectos del río Miera, el siguiente paso fue realizar el modelado hidrodinámico en el interior de la bahía para obtener las corrientes de alta resolución que condicionarán el comportamiento del derrame.

En base a los resultados obtenidos en el apartado anterior se determinó que el número escenarios de simulación a ejecutar con el modelo hidrodinámico H2D, viene determinado por la Eq. 11.

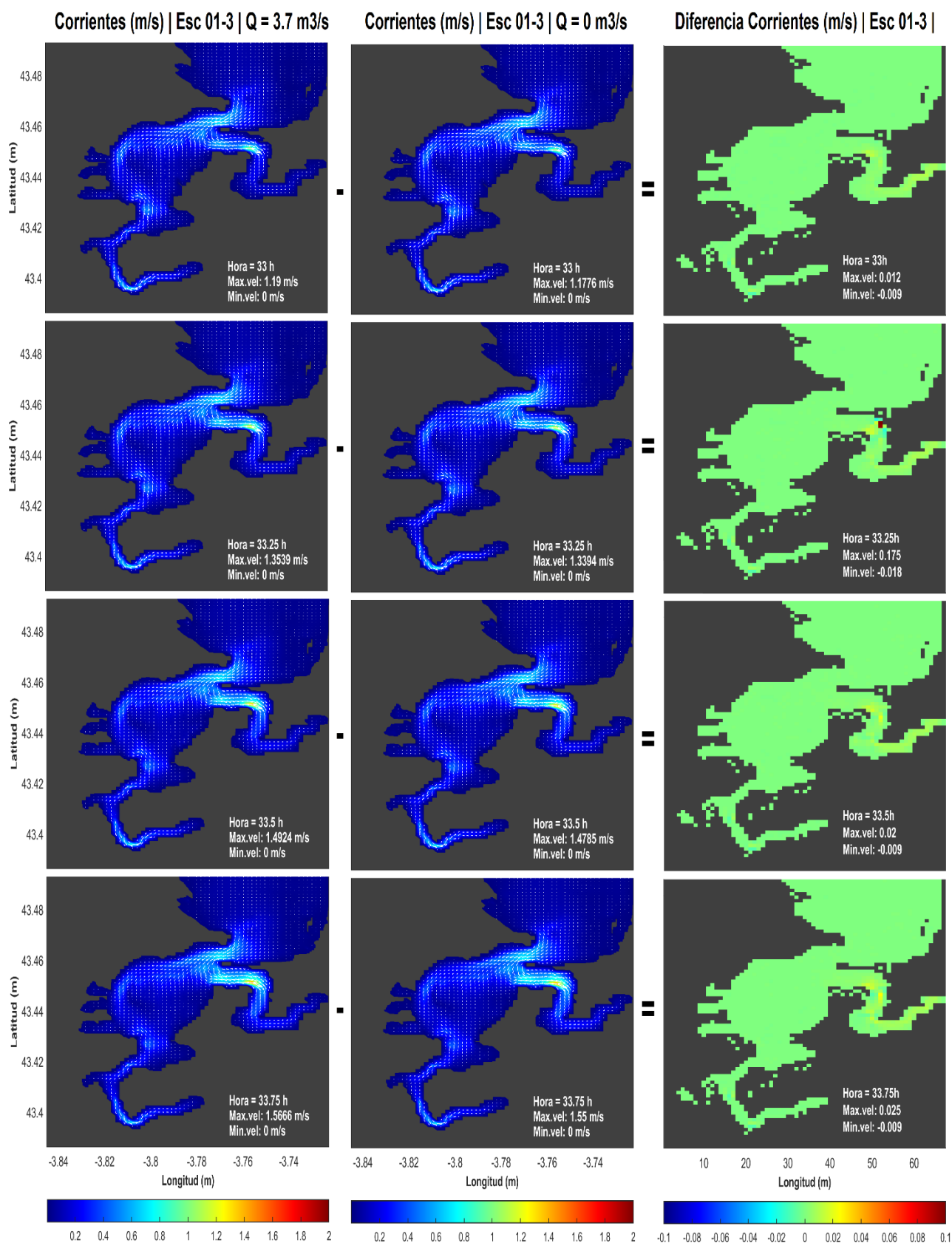


Fig. 14. Análisis de la diferencia espacial de las velocidades de corrientes al interior de la bahía de Santander con la influencia de un caudal medio ($Q = 3.7 \text{ m}^3/\text{s}$) y sin la influencia de caudal.

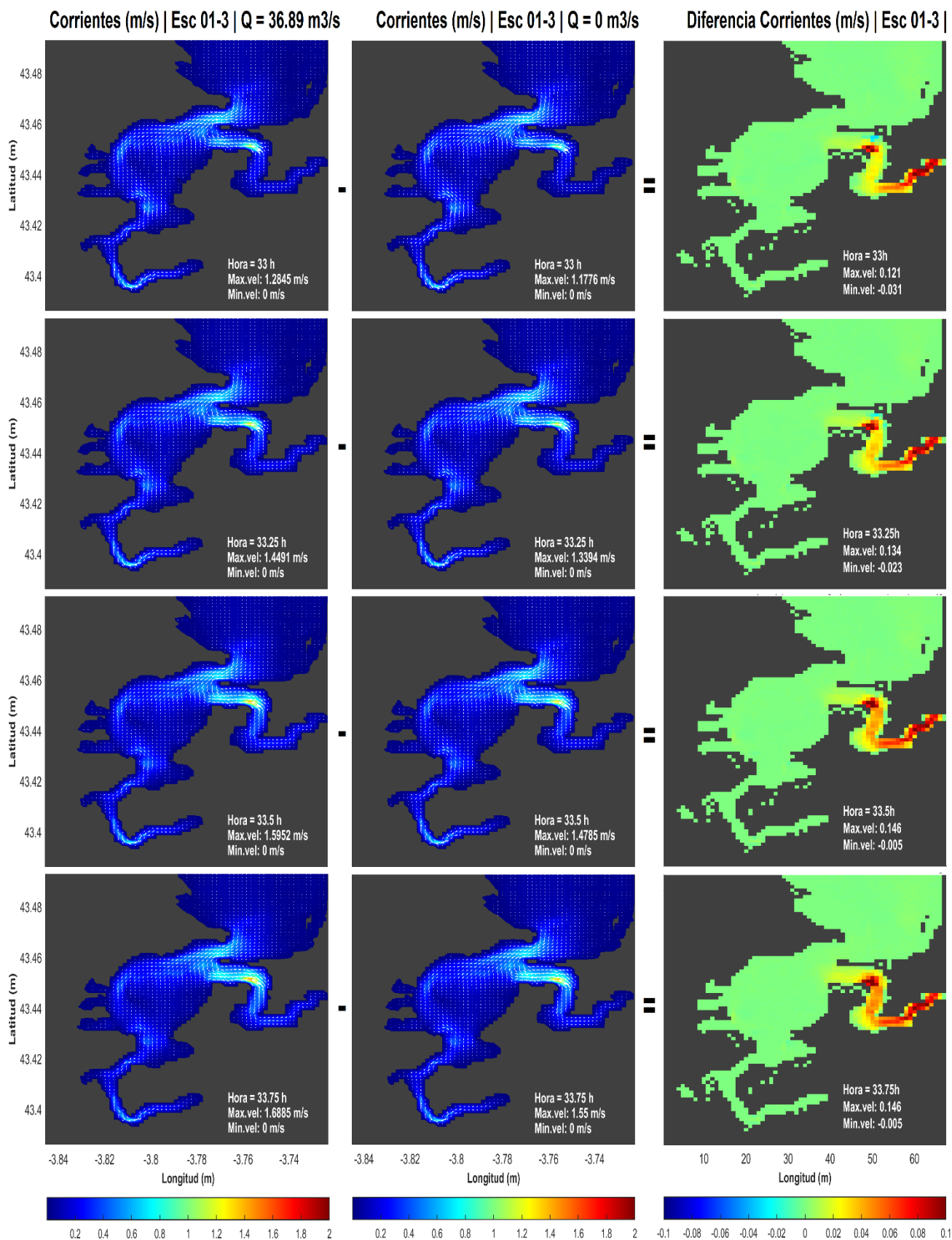


Fig. 15. Análisis de la diferencia espacial de las velocidades de corrientes al interior de la bahía de Santander con la influencia de un caudal extremo ($Q = 36.89 \text{ m}^3/\text{s}$) y sin la influencia de caudal.

$$[n^{\circ} \text{ escenarios}]_{\text{de simulación}} = \left\{ \left[\left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{direcciones} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{intensidades} \\ \text{viento} \end{matrix} \right) \right] + \left(\begin{matrix} \text{Condiciones} \\ \text{calma} \end{matrix} \right) \right\} * \left(\begin{matrix} n^{\circ} \\ \text{Amplitudes} \\ \text{mar} \end{matrix} \right)$$

$$[n^{\circ} \text{ escenarios}]_{\text{de simulación}} = \{[(8) * (3)] + (1)\} * (5)$$

$$[n^{\circ} \text{ escenarios}]_{\text{de simulación}} = 125$$

La configuración del modelo fue la misma empleada anteriormente, pero sin efectos del caudal y se fue cambiando los valores de amplitud de marea, dirección e intensidad de viento. Las combinaciones y configuración que se realizaron en el modelo están detalladas en el **Anexo 1**.

Cabe mencionar que cada resultado se simuló por 48 horas, pero los resultados se grabaron a partir de la hora 24 hasta la hora 48 (**Fig. 16**), existiendo un total de 97 pasos de tiempo en cada escenario de simulación. Las primeras 24 horas no fueron guardadas, debido a que se consideró este lapso de tiempo necesario para la estabilización del modelo.

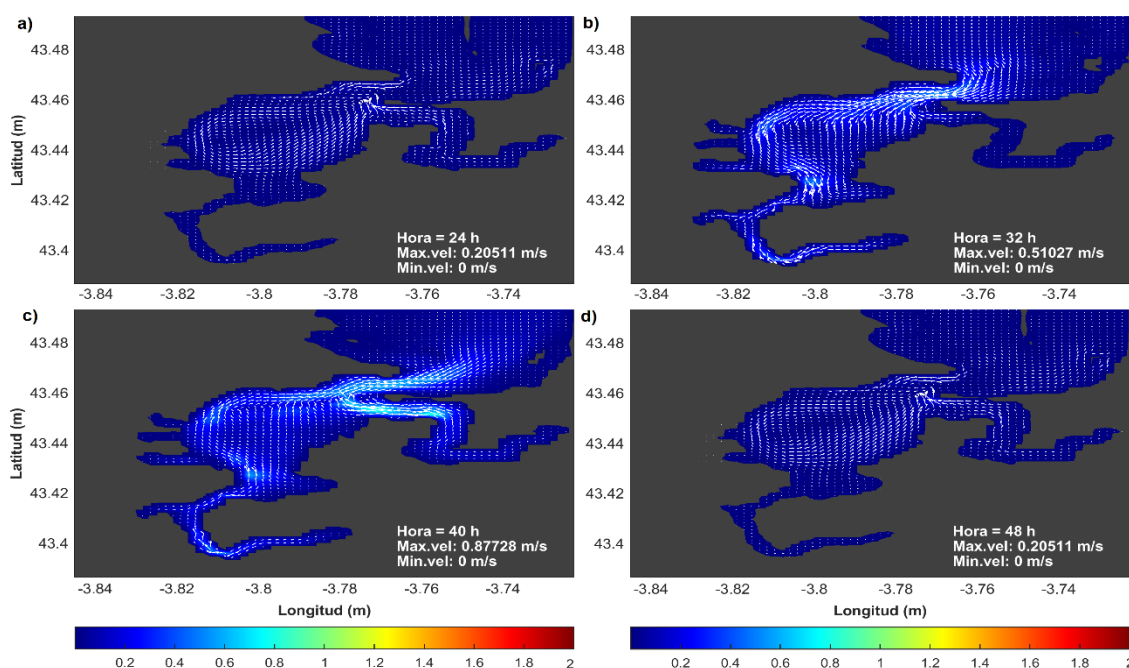


Fig. 16. Modelado hidrodinámico al interior de la bahía bajo condiciones de calma, con una amplitud media de 1.36m. Pasos de tiempo (a) al inicio de la simulación, (b) al cabo de 8 horas (hora 32), (c) al cabo de 16 horas (hora 42) y (d) al final de la simulación (hora 48).

Los resultados de cada simulación fueron empleados como un input para las simulaciones con el modelo numérico TESEO.

4.5. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD II – TAMAÑO DE MALLA Y Nº DE PARTÍCULAS

4.5.1. Combinación del número de partículas y tamaño de malla

Una vez obtenido los escenarios hidrodinámicos, el siguiente paso fue la simulación del derrame con el modelo numérico TESEO, pero antes de poder simular con el modelo, se empleó la metodología explicada en el apartado 3.5.5, debido a que el modelo de derrame de un químico y específicamente los valores de concentración, pueden verse muy influenciados por el tamaño de malla y número de partículas que se empleen.

Por lo cual se realizaron las simulaciones variando el tamaño de malla y el número de partículas (Fig. 17), con el objetivo de analizar la variación espacio – temporal de la concentración al interior de la bahía.

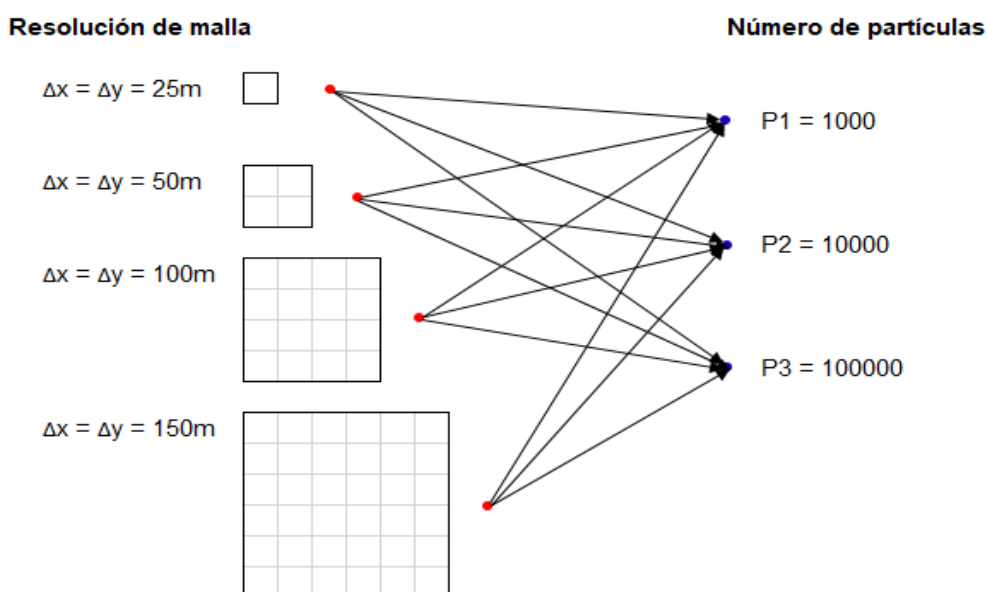


Fig. 17. Combinación de diversos tamaños de malla y números de partículas a emplearse en el análisis de sensibilidad con TESEO.

4.5.2. Configuración del modelo numérico TESEO

Para este proceso se emplearon los siguientes parámetros de configuración:

❖ Parámetros de vertido:

- Tipo de vertido: HNS
- Simulación de spreading: Si

- Simulación de evaporación: Si
- Viscosidad cinemática del agua de mar: $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- Vertido instantáneo: Si
- Masa inicial: 11680 kg
- Coordenada de vertido: X = -3.797, Y = 43.445
- Volumen de vertido: 15 m^3

❖ Características de la sustancia vertida: Ciclohexano

- Densidad: 778 kg/m³
- Temperatura de densidad: 20°C
- Viscosidad cinemática: $1.26 \text{ E}^{-06} \text{ cSt}$
- Temperatura de la viscosidad cinemática: 20°C
- Soluble en agua: No
- Presión de vapor: 12.6656 KPa
- Temperatura de presión de vapor: 25°C
- Peso molecular: 84.16 kg/kmol
- Densidad del agua de mar: 1027 kg/m³
- Temperatura superficial del mar
- Temperatura superficial del aire

❖ Forzantes:

- Corrientes: Si
- Oleaje: No
- Vientos: No

Una vez realizada estas simulaciones, el número de malla y de partículas óptimo se determinó analizando la variación temporal de la concentración en dos puntos: (i) el centro de gravedad del punto de vertido y (ii) el centro de gravedad de las partículas antes de que se logre su evaporación total.

La elección de los centros de gravedad nos permitió poder recopilar la mayor cantidad de información sobre la variación temporal de los valores de concentración del ciclohexano, en comparación a elegir un punto aleatorio (Fig. 18). Asimismo, se toma en cuenta el gasto computacional que se emplea en cada simulación.

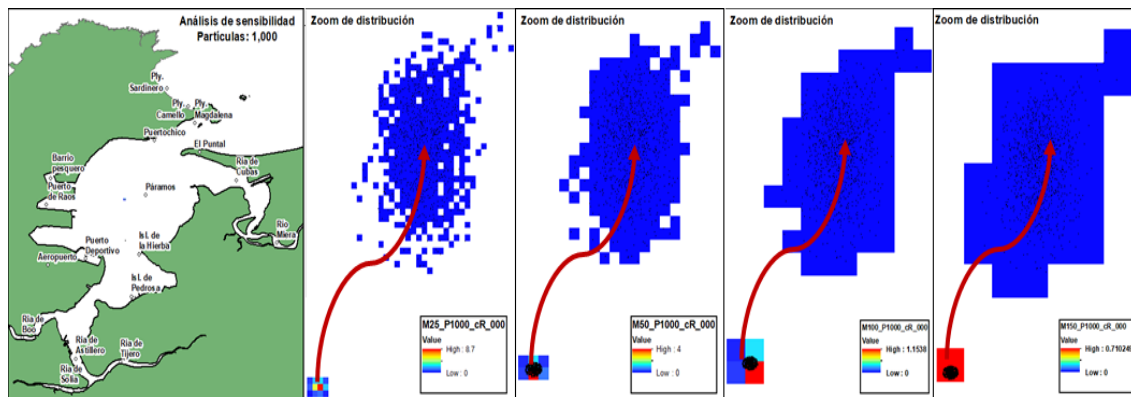


Fig. 18. Selección de puntos de análisis para cada tamaño de malla (25m, 50m, 100m y 150m) para un tiempo de 0 min., y un tiempo de 135 min.

4.5.2. Análisis del vertido

Tal y como se muestra en la [Fig. 17](#), se realizó una combinación de los diversos tamaños de malla con las 3 cantidades de partículas (1000, 10000 y 10000).

4.5.2.1. Análisis al inicio del vertido

Se analizó la variación de la concentración (mg/m^2) en el primer punto de análisis (centro de gravedad del punto de vertido) ([Fig. 19](#)), demostrándose que:

- Empleando 1000 y 10000 partículas ([Fig. 19. a, b](#)), se determinó que con una malla muy fina ($\Delta x = \Delta y = 25\text{m}$) y fina ($\Delta x = \Delta y = 50\text{m}$) se logró visualizar mejor la variación temporal de la concentración. Asimismo, de estas dos mallas, la malla muy fina representó el pico máximo de concentración al minuto 10, mientras que la malla fina lo representó al minuto 20. Caso contrario, empleando una malla gruesa ($\Delta x = \Delta y = 100\text{m}$) y muy gruesa ($\Delta x = \Delta y = 150\text{m}$) no fue posible visualizar la variación de la concentración.
- Empleando 100000 partículas ([Fig. 19. c](#)), se determinó que una malla muy fina ($\Delta x = \Delta y = 25\text{m}$) permitió representar mejor la variación temporal de la concentración. Esta concentración presentó un pico máximo al inicio de la simulación y decayó en función del tiempo llegando a ser 0 en el minuto 25. Con una malla muy gruesa ($\Delta x = \Delta y = 150\text{m}$), la variación de concentración decayó linealmente llegando a ser 0 en el minuto 45. A diferencia del análisis anterior, las mallas fina y gruesa presentaron una variación de la concentración muy parecida, demostrando que con estas mallas la concentración llega a 0 en el minuto 15.

Esta diferente variación temporal de concentración, se debió a que como las partículas se distribuyen aleatoriamente dentro del área de vertido ($\Delta x = \Delta y = 50\text{m}$), al momento de comenzar su dispersión y transporte la mayor concentración se obtendrá al cabo un tiempo y posteriormente decaerá. Pero al incrementar sustancialmente el número de partículas, la probabilidad de que la mayor cantidad de partículas esté en el centro de gravedad al inicio del vertido se incrementa.

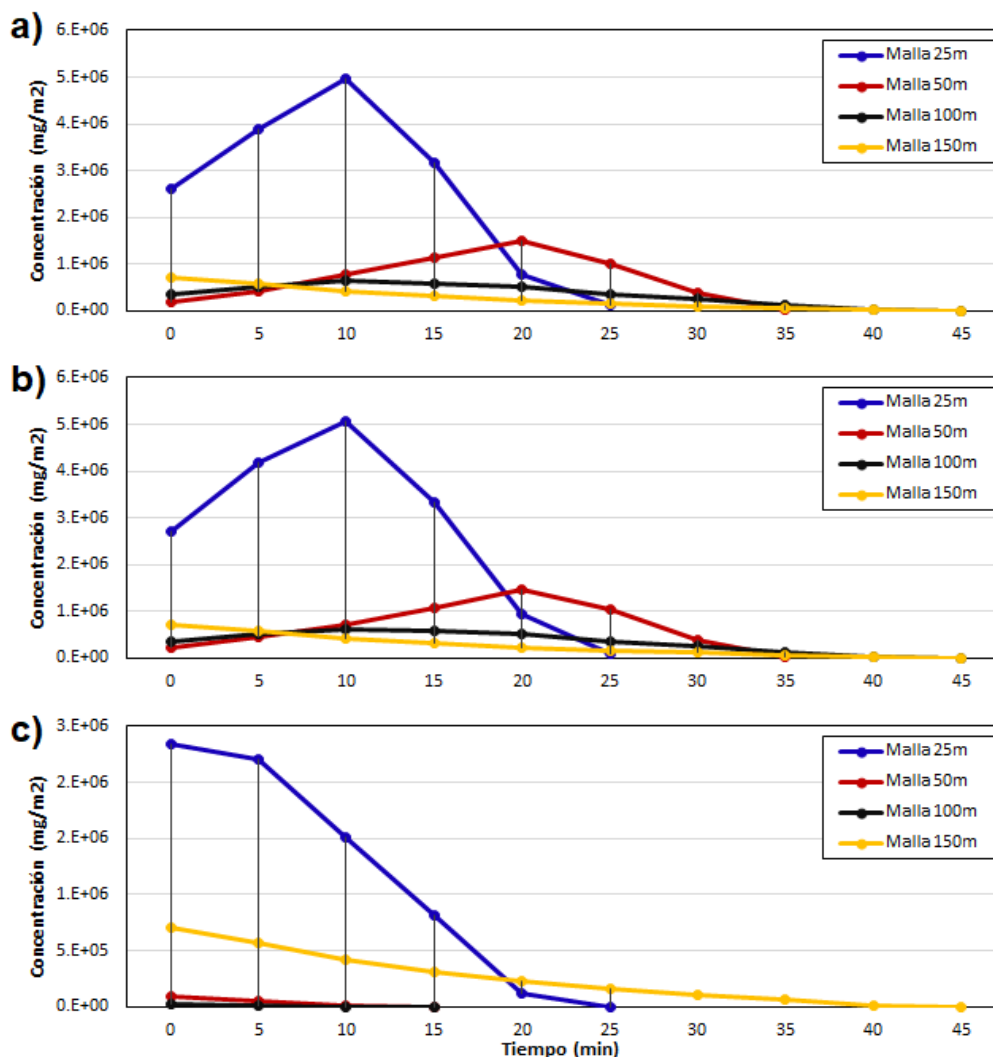


Fig. 19. Variación temporal de la concentración (mg/m^2) en el primer punto de análisis (centro de gravedad del punto de vertido) empleando los 4 tamaños de malla con (a) 1000, (b) 10000 y (c) 100000 partículas, desde un tiempo de 0min hasta 45 min.

4.5.2.2. Análisis antes de la evaporación del vertido

Se analizó la variación de la concentración (mg/m^2) en el segundo punto (centro de gravedad de la mancha antes de que se evapore en su totalidad) (Fig. 20), demostrándose que:

- Empleando 1000 partículas (**Fig. 20. a**), se determinó que con una malla muy fina ($\Delta x = \Delta y = 25\text{m}$) se presentaron pasos de tiempo en donde no se estuvieron valores de concentración, debido a que a partir del minuto 105 al minuto 135 la concentración se fue reduciendo considerablemente llegando a obtenerse un valor de 0 en algunas celdas de la malla. Una situación muy parecida se estuvo al emplear una malla fina ($\Delta x = \Delta y = 50\text{m}$), en donde solo se registraron valores de concentración entre el minuto 125 al 135. De otro lado, empleando una malla gruesa ($\Delta x = \Delta y = 100\text{m}$) y muy gruesa ($\Delta x = \Delta y = 150\text{m}$) se determinó como la concentración logra su pico máximo aproximadamente al minuto 120, para luego decaer hasta evaporarse por completo.
- Empleando 10000 y 100000 partículas (**Fig. 20. b, c**), se determinó que con todos los tamaños de malla el pico máximo de concentración estuvo entre los minutos 120 a 125. Las mallas que representaron mejor la variación de la concentración fueron la malla muy fina ($\Delta x = \Delta y = 25\text{m}$) y fina ($\Delta x = \Delta y = 50\text{m}$).

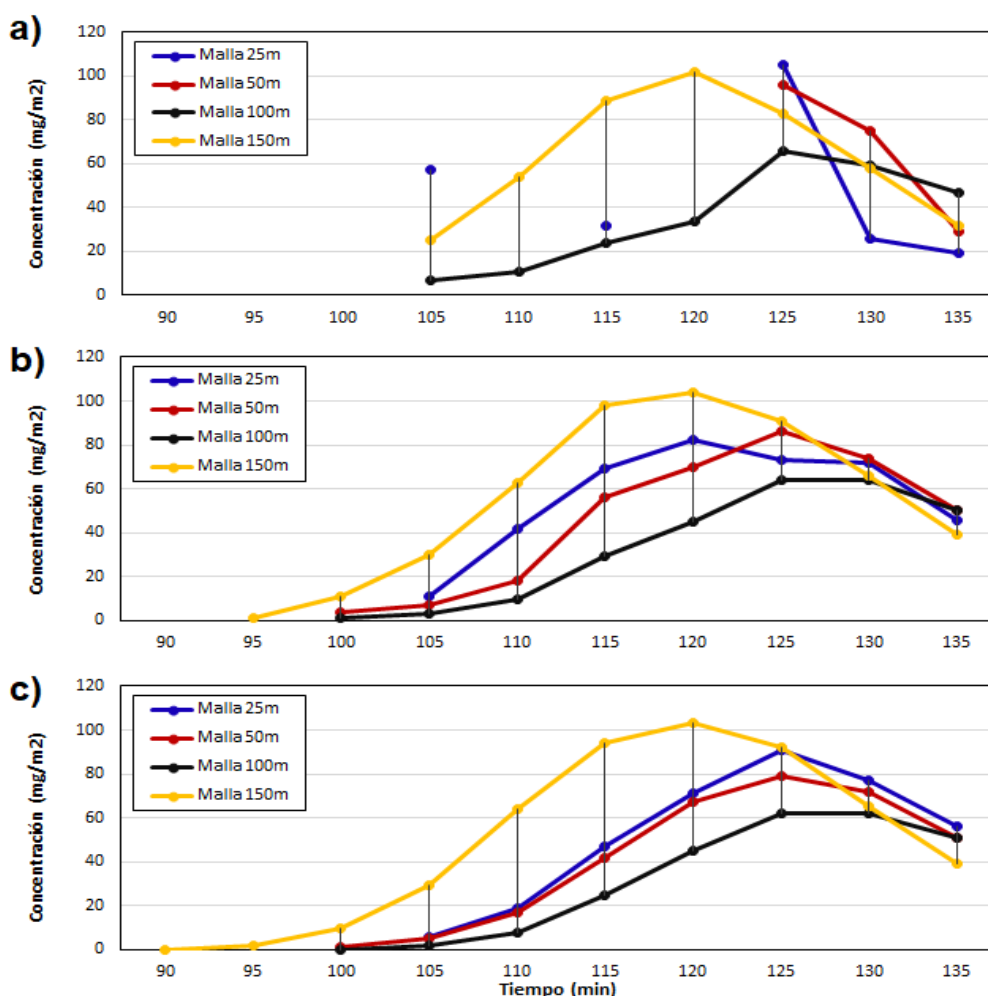


Fig. 20. Variación temporal de la concentración (mg/m^2) en el segundo punto de análisis (centro de gravedad de la mancha antes de evaporarse) empleando los 4 tamaños de malla con (a) 1000, (b) 10000 y (c) 100000 partículas, desde un tiempo de 90 min hasta 135 min.

4.5.3. Análisis del gasto computacional

Al mismo tiempo que se analizó la variación de la concentración en función de los diversos tamaños de malla y números de partículas, se analizó el gasto computacional en función del tiempo de simulación (Fig. 21).

Se determinó que a medida que se incrementa el tamaño de las mallas y el número de partículas, se va reduciendo el tiempo de cálculo.

- Con 1000 partículas, el gasto computacional empleando una malla muy fina, fina, gruesa y muy gruesa fue de 34.8s, 25.23s, 19.13s y 16.15s, respectivamente.
- Con 10000 partículas, el gasto computacional empleando una malla muy fina, fina, gruesa y muy gruesa fue de 135.4s, 108.85s, 98.95s y 93.48s, respectivamente.
- Con 100000 partículas, el gasto computacional empleando una malla muy fina, fina, gruesa y muy gruesa fue de 958.9s, 936.93s, 918.95s y 901.08s, respectivamente.

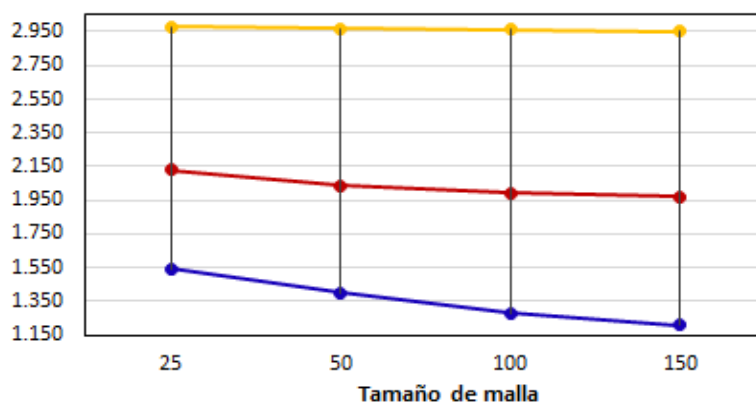


Fig. 21. Análisis del coste computacional empleando diferente tamaño de malla y diferente número de partículas: 1000 partículas (línea azul), 10000 partículas (línea roja) y 100000 partículas (línea naranja).

En base a estos resultados, se podría determinar que la mejor combinación sería emplear una malla muy fina ($\Delta x = \Delta y = 25m$) y 100000 partículas, pero esto implicaría un gasto computacional demasiado alto y repetir este proceso para el resto de simulaciones tomaría días o incluso una semana más de cálculo. Por lo cual, se determinó emplear como tamaño de malla óptimo una malla fina ($\Delta x = \Delta y = 50m$), mientras que el número de partículas óptimo fue de 10000. La selección de estos parámetros, fue debido a que permiten determinar también de forma más precisa la variación temporal de la concentración al inicio de la simulación como en diversos pasos de tiempo. Asimismo, el coste computacional se considera como aceptable para las nuevas simulaciones.

4.6. MODELADO NUMÉRICO DE LA EVOLUCIÓN DEL DERRAME

En base a los resultados obtenidos en el apartado anterior se determinó que el número escenarios de simulación a ejecutar con el modelo numérico TESEO viene determinado por la Eq. 13.

$$\left[\begin{array}{c} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{TESEO} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{H2D} \end{array} \right] * \left(\begin{array}{c} n^{\circ} \\ \text{Fases de marea} \end{array} \right) * \left(\begin{array}{c} \text{Temperatura del} \\ \text{aire y del mar} \end{array} \right)$$

$$\left[\begin{array}{c} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{TESEO} \end{array} \right] = [125] * (4) * (2)$$

$$\left[\begin{array}{c} n^{\circ} \text{ escenarios} \\ \text{de simulación} \\ \text{TESEO} \end{array} \right] = 1000$$

La configuración del modelo fue la misma empleada en el apartado 4.5.2, solo que en este caso las simulaciones se realizaron con una malla fina y con 10000 partículas. Cabe mencionar que de las 1000 simulaciones, 500 corresponden a la estación de verano y 500 a la estación de invierno. Para lo cual se emplearon valores de temperatura superficial del aire y del mar de verano e invierno.

4.7. MAPAS DE PROBABILIDAD ACUMULADA

Una vez simulado los 500 escenarios para verano y 500 para invierno se empleó un script en Matlab para poder obtener la probabilidad acumulada de en cada estación, cabe mencionar que esta probabilidad final fue obtenida empleando la Eq. 14, explicada en el apartado 3.5.7.

4.7.1. Probabilidad acumulada en invierno

El mapa de probabilidad acumulada para esta estación permite visualizar que en la zona oeste y sur-este de la bahía la probabilidad de contaminación fue muy baja afectando al Puerto de Raos, puerto deportivo y el aeropuerto; en la zona sur-este de la bahía la probabilidad fue baja afectando al pantalán, barrio pesquero y al interior de la bahía próxima a isla de Pedrosa; en la zona nor-este de la bahía la probabilidad fue relativamente alta a muy alta afectando El puntal, la playa de la magdalena y al Puerto chico. Al interior de la bahía los niveles de probabilidad fueron muy altos ([Fig. 22](#)).

El motivo por el cual la probabilidad de contaminación se extendió en casi toda la bahía, fue debido principalmente a:

- La hidrodinámica interna de la bahía de Santander, propició que el vertido de ciclohexano se propague rápidamente antes de poder evaporarse, tanto al interior de la bahía como hasta zonas próximas a la isla de Mouro.
- En esta estación, los valores de temperatura superficial del aire y de agua de mar fueron relativamente bajos, siendo de 10.18°C y 14.44°C, respectivamente. Esto favoreció a la ralentización de los procesos de evaporación del ciclohexano.

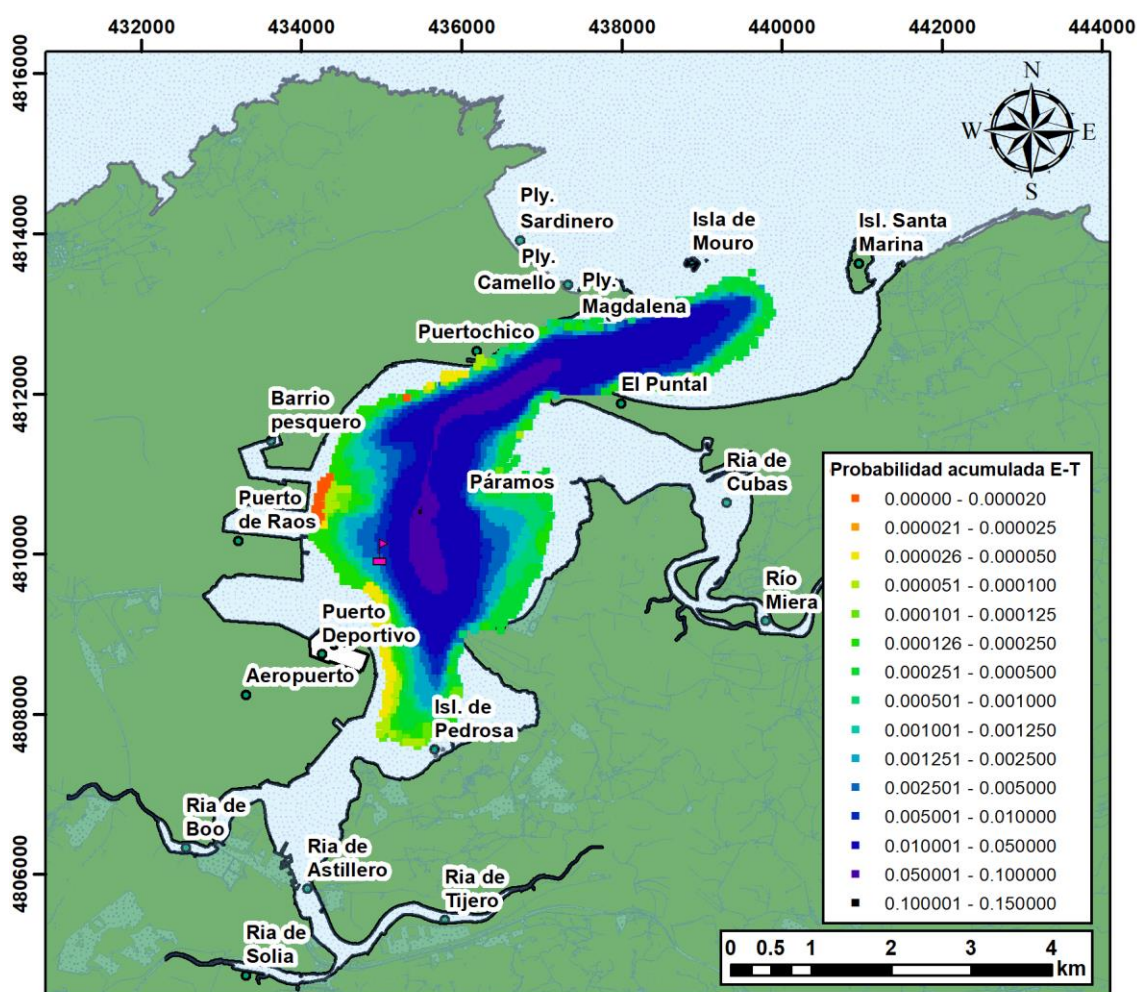


Fig. 22. Mapa de probabilidad acumulada de contaminación del ciclohexano al interior de la bahía de Santander, para la estación de invierno.

4.7.2. Probabilidad acumulada en verano

El mapa de probabilidad acumulada para esta estación presentó la misma distribución espacial que en la estación de invierno. Pero a diferencia de la estación anterior, en verano la probabilidad de contaminación a las zonas próximas a la bahía fue muy

reducida. Por otra parte, la mayor probabilidad de contaminación fue registrada en el centro de la bahía y en la sección del canal en dirección a mar abierto (Fig. 23).

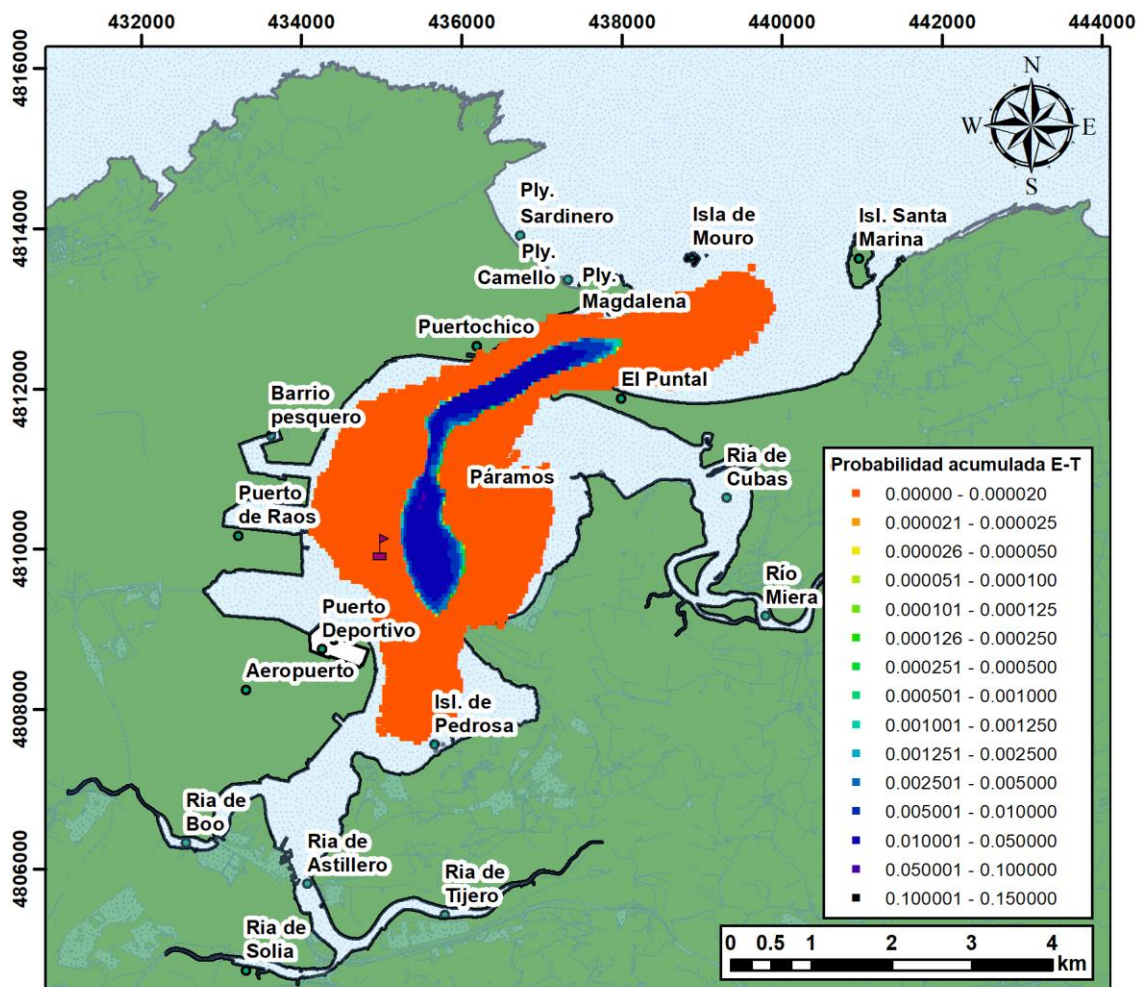


Fig. 23. Mapa de probabilidad acumulada de contaminación del ciclohexano al interior de la bahía de Santander, para la estación de verano.

Esta gran diferencia con respecto a la estación anterior, se debe a que en verano los valores de temperatura del aire y agua de mar promedio fueron de 20.37°C y 21.47°C, respectivamente, esto favoreció a la rápida evaporación del ciclohexano.

CAPÍTULO V: CONCLUSIONES

Se concluye que el número total de escenarios meteo – oceanográficos estuvieron determinados por el viento costero, del cual se determinaron 8 direcciones de viento y 3 intensidades por cada dirección, incluida la región de calma, y por la marea astronómica del cual se determinaron 4 fases y 5 amplitudes de marea.

La influencia que ejerce el caudal del río Miera en la hidrodinámica interna de la bahía es muy reducida, bajo esta escala la mayor alteración fue determinada en la desembocadura del río y no en zonas próximas al punto de derrame. Por lo cual, se descartó algún efecto del río relevante en el comportamiento del derrame y solo se emplearon las forzantes meteo – oceanográficas para las sucesivas simulaciones.

La combinación óptima de resolución espacial de malla y número de partículas fue una malla fina ($\Delta x = \Delta y = 50\text{m}$) y 10000 partículas, debido a que esta combinación permitió determinar de forma precisa la variación temporal de la concentración al inicio de la simulación como en diversos pasos de tiempo. El coste computacional de esta combinación fue considerado como aceptable para las sucesivas simulaciones.

El modelado numérico se realizó empleando para ello las salidas del modelo hidrodinámico H2D, las fases de marea y los valores promedios de temperatura. Generando en total 1000 simulaciones, de las cuales 500 correspondieron a la estación de verano y 500 a la estación de invierno.

La probabilidad acumulada espacio – temporal en ambas estaciones determinó que las potenciales zonas afectadas por la contaminación del ciclohexano son los principales sectores socio-económicos (Puerto de Raos, Puerto deportivo y el Aeropuerto), en donde el nivel de afectación será menor debido a que el ciclohexano no llega hasta la costa, descartándose una posible afectación toxicológica a las personas. Pero en las zonas de recreación y turismo (el Puntal, playa La Magdalena y Puerto chico) el ciclohexano presenta una alta probabilidad de contaminación, llegando incluso hasta la costa, lo que representa un riesgo de afectación toxicológica a las personas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abascal, A.J., Castanedo, S., Gutierrez, A. D., Comerma, E., Medina, R., & Losada, I. J. (2007). Teseo , an Operational System for Simulating Oil Spills Trajectories and. *Proceedings of the International Offshore and Polar Engineering Conference*, (January), 1751–1758.
- Abascal, Ana J., Cárdenas, M., Castanedo, S., & Medina, R. (2011). Desarrollo de una metodología de predicción a medio-largo plazo de derrames de hidrocarburos y su aplicación en la lucha contra la contaminación marina. *Fundacionmapfre.Org*.
- Abascal, Ana J., Castanedo, S., Medina, R., & Liste, M. (2010). Analysis of the reliability of a statistical oil spill response model. *Marine Pollution Bulletin*, 60(11), 2099–2110. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2010.07.008>
- Abascal, Ana J., Castanedo, S., Núñez, P., Mellor, A., Clements, A., Pérez, B., ... Medina, R. (2017). A high-resolution operational forecast system for oil spill response in Belfast Lough. *Marine Pollution Bulletin*, 114(1), 302–314. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.09.042>
- Alves, T. M., Kokinou, E., Zodiatis, G., Lardner, R., Panagiotakis, C., & Radhakrishnan, H. (2015). Modelling of oil spills in confined maritime basins: The case for early response in the Eastern Mediterranean Sea. *Environmental Pollution*, 206, 390–399. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2015.07.042>
- Amir-Heidari, P., & Raie, M. (2018). Probabilistic risk assessment of oil spill from offshore oil wells in Persian Gulf. *Marine Pollution Bulletin*, 136(September), 291–299. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2018.07.068>
- Armanfar, M., Goharnejad, H., Niri, M. Z., & Perrie, W. (2019). Assessment of coastal vulnerability in Chabahar Bay due to climate change scenarios. *Oceanologia*. <https://doi.org/10.1016/j.oceano.2019.03.001>
- Autoridad Portuaria de Santander. (2014). *Memoria anual 2014*.
- Baawain, M. S., Sana, A., Al-Sabahi, J. N., Al-Wardy, M. M., & Al-Yaqoobi, A. H. (2011). Oil and Chemical Spills. In *Encyclopedia of Environmental Health* (2nd ed.). <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-52272-6.00567-5>
- Barker, C. H. (2003). *The NOAA trajectory analysis planner: TAP 11*. (Scenario

- C), 1256–1261. <https://doi.org/10.1109/oceans.1999.800171>
- Beegle-Krause, J. (2001). General Noaa Oil Modeling Environment (Gnome): a New Spill Trajectory Model. *International Oil Spill Conference Proceedings*, 2001(2), 865–871. <https://doi.org/10.7901/2169-3358-2001-2-865>
- Braskem. (2017). *Cyclohexane. Safety data sheet*.
- Castanedo, S., Juanes, J. A., Medina, R., Puente, A., Fernandez, F., Olabarrieta, M., & Pombo, C. (2009). Oil spill vulnerability assessment integrating physical, biological and socio-economical aspects: Application to the Cantabrian coast (Bay of Biscay, Spain). *Journal of Environmental Management*, 91(1), 149–159. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2009.07.013>
- Chem-Lab. (2018). *Ciclohexano p. Safety data sheet* (Vol. 2006).
- Chen, J., Zhang, W., Wan, Z., Li, S., Huang, T., & Fei, Y. (2019). Oil spills from global tankers: Status review and future governance. *Journal of Cleaner Production*, 227, 20–32. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.04.020>
- Cucco, A., Sinerchia, M., Ribotti, A., Olita, A., Fazioli, L., Perilli, A., ... Sorgente, R. (2012). A high-resolution real-time forecasting system for predicting the fate of oil spills in the Strait of Bonifacio (western Mediterranean Sea). *Marine Pollution Bulletin*, 64(6), 1186–1200. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2012.03.019>
- Cunha, I., Moreira, S., & Santos, M. M. (2015). Review on hazardous and noxious substances (HNS) involved in marine spill incidents-An online database. *Journal of Hazardous Materials*, 285, 509–516. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2014.11.005>
- Cunha, I., Oliveira, H., Neuparth, T., Torres, T., & Santos, M. M. (2016). Fate, behaviour and weathering of priority HNS in the marine environment: An online tool. *Marine Pollution Bulletin*, 111(1–2), 330–338. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.06.090>
- Gad, S. E. (2014). Cyclohexane. *Encyclopedia of Toxicology: Third Edition*, 1, 1106–1108. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-386454-3.00835-6>
- Goodchild, M. F. (2015). Geographic Information Systems. In *International Encyclopedia of the Social & Behavioral Sciences* (Second Edi, Vol. 10). <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-097086-8.72018-6>

- Harold, P. D., de Souza, A. S., Louchart, P., Russell, D., & Brunt, H. (2014). Development of a risk-based prioritisation methodology to inform public health emergency planning and preparedness in case of accidental spill at sea of hazardous and noxious substances (HNS). *Environment International*, 72, 157–163. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2014.05.012>
- Illiyaş, F. T., & Mohan, K. (2016). Onshore preparedness for hazardous chemical marine vessel accidents: A case study. *Jàmbá: Journal of Disaster Risk Studies*, 8(1), 1–7. <https://doi.org/10.4102/jamba.v8i1.246>
- INSHT. (2009). *Documentación toxicológica para el establecimiento del límite de exposición profesional del Ciclohexano*. Retrieved from http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/TextosOnline/Valores_Limite/Doc_Toxicologica/Ficheros/DLEP10.pdf
- Jeong, H., Park, M., Hwang, W., Kim, E., & Han, M. (2013). The effect of calm conditions and wind intervals in low wind speed on atmospheric dispersion factors. *Annals of Nuclear Energy*, 55, 230–237. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2012.12.018>
- Juanes, J. A., Bidegain, G., Echavarri-Erasun, B., Puente, A., García, A., García, A., ... García-Castillo, G. (2012). Differential distribution pattern of native *Ruditapes decussatus* and introduced *Ruditapes philippinarum* clam populations in the Bay of Santander (Gulf of Biscay): Considerations for fisheries management. *Ocean and Coastal Management*, 69, 316–326. <https://doi.org/10.1016/j.ocecoaman.2012.08.007>
- Keviczky, L., Bars, R., Hetthéssy, J., & Bányász, C. (2019). Introduction to MATLAB. In *Advanced Textbooks in Control and Signal Processing*. https://doi.org/10.1007/978-981-10-8321-1_1
- King, A. P., & Aljabar, P. (2017). Introduction to Computer Programming and MATLAB. *MATLAB Programming for Biomedical Engineers and Scientists*, 1–29. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-812203-7.00001-x>
- Kirby, M. F., & Law, R. J. (2010). Accidental spills at sea - Risk, impact, mitigation and the need for co-ordinated post-incident monitoring. *Marine Pollution Bulletin*, 60(6), 797–803. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2010.03.015>
- Law, R. J., & Allchin, C. R. (1994). Hexachlorocyclohexanes in seawater in the English Channel 1989-1993, following the loss of MV Perintis. *Marine*

- Pollution Bulletin*, 28(11), 704–706. [https://doi.org/10.1016/0025-326X\(94\)90307-7](https://doi.org/10.1016/0025-326X(94)90307-7)
- Law, R J, & Campbell, J. A. (1998). *The Effects of Oil and Chemical Spillages at Sea*. 245–249.
- Law, Robin J., Kelly, C., Matthiessen, P., & Aldridge, J. (2003). The loss of the chemical tanker *levoli Sun* in the English Channel, October 2000. *Marine Pollution Bulletin*, 46(2), 254–257. [https://doi.org/10.1016/S0025-326X\(02\)00222-9](https://doi.org/10.1016/S0025-326X(02)00222-9)
- Legrand, S., Poncet, F., Aprin, L., Parthenay, V., Donnay, E., Carvalho, G., ... Youdjou, N. (2017). Understanding HNS behaviour in the marine environment. In *HNS-MS final report* (pp. 1–152).
- Luttrell, W. E., & Lyiza, C. (2010). Cyclohexane. *Journal of Chemical Health and Safety*, 17(3), 33–34. <https://doi.org/10.1016/j.jchas.2010.03.009>
- Nelson, J. R., Grubestic, T. H., Sim, L., Rose, K., & Graham, J. (2015). Approach for assessing coastal vulnerability to oil spills for prevention and readiness using GIS and the Blowout and Spill Occurrence Model. *Ocean and Coastal Management*, 112, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.ocecoaman.2015.04.014>
- Neuparth, T., Capela, R., Rey-Salgueiro, L., Moreira, S. M., Santos, M. M., & Reis-Henriques, M. A. (2013). Simulation of a hazardous and noxious substances (HNS) spill in the marine environment: Lethal and sublethal effects of acrylonitrile to the european seabass. *Chemosphere*, 93(6), 978–985. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2013.05.064>
- Neuparth, T., Moreira, S., Santos, M. M., & Reis-Henriques, M. A. (2011). Hazardous and Noxious Substances (HNS) in the marine environment: Prioritizing HNS that pose major risk in a European context. *Marine Pollution Bulletin*, 62(1), 21–28. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2010.09.016>
- NOAA. (2015). *An FOSC 's Guide to NOAA Scientific Support*. (June).
- Otero Díaz, L. J. (2005). Aplicación de un Modelo Hidrodinámico Bidimensional para describir las Corrientes y la Propagación de la Onda de Marea en la Bahía de Buenaventura. *Boletín Científico CCCP*, 12(12), 9–21. https://doi.org/10.26640/01213423.12.9_21
- Pérez-fernández, B., Viñas, L., & Besada, V. (2019). Science of the Total Environment A new perspective on marine assessment of metals and

- organic pollutants : A case study from Bay of Santander. *Science of the Total Environment*, 691, 156–164. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.07.049>
- Plakidas, K., Schall, D., & Zdun, U. (2017). Evolution of the R software ecosystem: Metrics, relationships, and their impact on qualities. *Journal of Systems and Software*, 132, 119–146. <https://doi.org/10.1016/j.jss.2017.06.095>
- Puertos del Estado. (2013). *Calidad de las aguas litorales en áreas portuarias. ROM 5.1-13.*
- Readman, J. W., Guitart, C., Frickers, T., & Law, R. J. (2007). An assessment of chemical pollution from the MSC Napoli. *Marine Pollution Bulletin*, 54(5), 501–503. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2007.03.007>
- Rial, D., León, V. M., & Bellas, J. (2017). Integrative assessment of coastal marine pollution in the Bay of Santander and the Upper Galician Rias. *Journal of Sea Research*, 130, 239–247. <https://doi.org/10.1016/j.seares.2017.03.006>
- Rodríguez Benítez, A. J., Álvarez Díaz, C., García Gómez, A., & García-Alba, J. (2018). Methodological approaches for delimitating mixing zones in rivers: establishing admissibility criteria and flow regime representation. *Environmental Fluid Mechanics*, 18(5), 1227–1256. <https://doi.org/10.1007/s10652-018-9593-9>
- Salamanca, D., Dobslaw, D., & Engesser, K. H. (2017). Removal of cyclohexane gaseous emissions using a biotrickling filter system. *Chemosphere*, 176, 97–107. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2017.02.078>
- Salami, A. A., Ajavon, A. S. A., Kodjo, M. K., & Bedja, K. S. (2013). Contribution to improving the modeling of wind and evaluation of the wind potential of the site of Lome: Problems of taking into account the frequency of calm winds. *Renewable Energy*, 50, 449–455. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2012.06.057>
- Samuels, W. B., Amstutz, D. E., Bahadur, R., & Ziemniak, C. (2013). Development of a Global Oil Spill Modeling System. *Earth Science Research*, 2(2), 52–61. <https://doi.org/10.5539/esr.v2n2p52>
- Schneiderbauer, S., & Ehrlich, D. (2004). Risk, hazard and people's vulnerability to natural hazards: A review of definitions, concepts and data. *European*

- Commission. Joint Research Centre.
- SINTEF. (2010). *Marine Environmental Technology*.
- Socolofsky, S. A., Gros, J., North, E., Boufadel, M. C., Parkerton, T. F., & Adams, E. E. (2019). The treatment of biodegradation in models of sub-surface oil spills: A review and sensitivity study. *Marine Pollution Bulletin*, 143, 204–219. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2019.04.018>
- Tornero, V., & Hanke, G. (2016). Chemical contaminants entering the marine environment from sea-based sources: A review with a focus on European seas. *Marine Pollution Bulletin*, 112(1–2), 17–38. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.06.091>
- UNCTAD. (2018). *Review of Maritime Transport 2017*. <https://doi.org/10.18356/a9b345e7-en>
- Vergeynst, L., Wegeberg, S., Aamand, J., Lassen, P., Gosewinkel, U., Fritt-Rasmussen, J., ... Mosbech, A. (2018). Biodegradation of marine oil spills in the Arctic with a Greenland perspective. *Science of the Total Environment*, 626, 1243–1258. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.01.173>
- Viguri, J., Verde, J., & Irabien, A. (2002). Environmental assessment of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in surface sediments of the Santander Bay, Northern Spain. *Chemosphere*, 48(2), 157–165. [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(02\)00105-4](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(02)00105-4)
- Walker, T. R., Adebambo, O., Del Aguila Feijoo, M. C., Elhaimer, E., Hossain, T., Edwards, S. J., ... Zomorodi, S. (2018). Environmental Effects of Marine Transportation. In *World Seas: an Environmental Evaluation* (Second Edi). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-805052-1.00030-9>
- Wallach, D., Makowski, D., Jones, J. W., & Brun, F. (2019). The R Programming Language and Software. In *Working with Dynamic Crop Models*. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-811756-9.00002-2>
- Walsh, C., Lazarou, N. J., Traut, M., Price, J., Raucci, C., Sharmina, M., ... Smith, T. (2019). Trade and trade-offs: Shipping in changing climates. *Marine Policy*, (September 2018), 103537. <https://doi.org/10.1016/j.marpol.2019.103537>
- Yu, X., Zhang, W., Liu, X., Lei, J., Lin, Z., Yao, Z., ... Huang, H. (2018). The distribution of and biodegradation impact on spilled oil in sediments from

- Dalian Bay, NE China. *Marine Pollution Bulletin*, 135(March), 1007–1015.
<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2018.08.032>
- Zhang, B., Matchinski, E. J., Chen, B., Ye, X., Jing, L., & Lee, K. (2018). Marine Oil Spills—Oil Pollution, Sources and Effects. In *World Seas: an Environmental Evaluation* (Second Edi). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-805052-1.00024-3>
- Zhong, S., Zhou, L., & Wang, Z. (2011). Software for environmental impact assessment of air pollution dispersion based on ArcGIS. *Procedia Environmental Sciences*, 10(PART C), 2792–2797.
<https://doi.org/10.1016/j.proenv.2011.09.433>

ANEXO 1

Listado de configuración de los escenarios de simulación para H2D

Tabla A1. Configuración de los escenarios de simulación a ser lanzados con el modelo H2D, y las probabilidades de ocurrencia de cada

N	ESC.	SUB ESCENARIOS	VIENTOS			MAREA		
			Dir (°)	m/s	%	CM (m)	Amp. (m)	%
1	CALMA	E01_1	0.00	0.00	14.68%	1.63	0.81	10.00%
2		E01_2	0.00	0.00	14.68%	2.20	1.10	20.00%
3		E01_3	0.00	0.00	14.68%	2.72	1.36	20.00%
4		E01_4	0.00	0.00	14.68%	3.14	1.57	20.00%
5		E01_5	0.00	0.00	14.68%	3.89	1.95	30.00%
6	REGIÓN 1	E02_1	11.25	2.70	2.29%	1.63	0.81	10.00%
7		E02_2	11.25	2.70	2.29%	2.20	1.10	20.00%
8		E02_3	11.25	2.70	2.29%	2.72	1.36	20.00%
9		E02_4	11.25	2.70	2.29%	3.14	1.57	20.00%
10		E02_5	11.25	2.70	2.29%	3.89	1.95	30.00%
11	REGIÓN 2	E03_1	56.25	2.52	4.34%	1.63	0.81	10.00%
12		E03_2	56.25	2.52	4.34%	2.20	1.10	20.00%
13		E03_3	56.25	2.52	4.34%	2.72	1.36	20.00%
14		E03_4	56.25	2.52	4.34%	3.14	1.57	20.00%
15		E03_5	56.25	2.52	4.34%	3.89	1.95	30.00%
16	REGIÓN 3	E04_1	101.25	3.24	7.75%	1.63	0.81	10.00%
17		E04_2	101.25	3.24	7.75%	2.20	1.10	20.00%
18		E04_3	101.25	3.24	7.75%	2.72	1.36	20.00%
19		E04_4	101.25	3.24	7.75%	3.14	1.57	20.00%
20		E04_5	101.25	3.24	7.75%	3.89	1.95	30.00%
21	REGIÓN 4	E05_1	146.25	2.62	1.84%	1.63	0.81	10.00%
22		E05_2	146.25	2.62	1.84%	2.20	1.10	20.00%
23		E05_3	146.25	2.62	1.84%	2.72	1.36	20.00%
24		E05_4	146.25	2.62	1.84%	3.14	1.57	20.00%
25		E05_5	146.25	2.62	1.84%	3.89	1.95	30.00%
26	REGIÓN 5	E06_1	191.25	2.86	2.75%	1.63	0.81	10.00%
27		E06_2	191.25	2.86	2.75%	2.20	1.10	20.00%
28		E06_3	191.25	2.86	2.75%	2.72	1.36	20.00%
29		E06_4	191.25	2.86	2.75%	3.14	1.57	20.00%
30		E06_5	191.25	2.86	2.75%	3.89	1.95	30.00%
31	REGIÓN 6	E07_1	236.25	3.04	5.09%	1.63	0.81	10.00%
32		E07_2	236.25	3.04	5.09%	2.20	1.10	20.00%
33		E07_3	236.25	3.04	5.09%	2.72	1.36	20.00%
34		E07_4	236.25	3.04	5.09%	3.14	1.57	20.00%
35		E07_5	236.25	3.04	5.09%	3.89	1.95	30.00%
36	REGIÓN 7	E08_1	281.25	3.83	9.73%	1.63	0.81	10.00%
37		E08_2	281.25	3.83	9.73%	2.20	1.10	20.00%
38		E08_3	281.25	3.83	9.73%	2.72	1.36	20.00%
39		E08_4	281.25	3.83	9.73%	3.14	1.57	20.00%
40		E08_5	281.25	3.83	9.73%	3.89	1.95	30.00%
41	REGIÓN 8	E09_1	326.25	3.04	5.11%	1.63	0.81	10.00%
42		E09_2	326.25	3.04	5.11%	2.20	1.10	20.00%
43		E09_3	326.25	3.04	5.11%	2.72	1.36	20.00%
44		E09_4	326.25	3.04	5.11%	3.14	1.57	20.00%

45		E09_5	326.25	3.04	5.11%	3.89	1.95	30.00%
46	REGIÓN 1	E10_1	11.25	4.76	1.33%	1.63	0.81	10.00%
47		E10_2	11.25	4.76	1.33%	2.20	1.10	20.00%
48		E10_3	11.25	4.76	1.33%	2.72	1.36	20.00%
49		E10_4	11.25	4.76	1.33%	3.14	1.57	20.00%
50		E10_5	11.25	4.76	1.33%	3.89	1.95	30.00%
51	REGIÓN 2	E11_1	56.25	3.90	6.70%	1.63	0.81	10.00%
52		E11_2	56.25	3.90	6.70%	2.20	1.10	20.00%
53		E11_3	56.25	3.90	6.70%	2.72	1.36	20.00%
54		E11_4	56.25	3.90	6.70%	3.14	1.57	20.00%
55		E11_5	56.25	3.90	6.70%	3.89	1.95	30.00%
56	REGIÓN 3	E12_1	101.25	5.22	7.47%	1.63	0.81	10.00%
57		E12_2	101.25	5.22	7.47%	2.20	1.10	20.00%
58		E12_3	101.25	5.22	7.47%	2.72	1.36	20.00%
59		E12_4	101.25	5.22	7.47%	3.14	1.57	20.00%
60		E12_5	101.25	5.22	7.47%	3.89	1.95	30.00%
61	REGIÓN 4	E13_1	146.25	4.18	0.71%	1.63	0.81	10.00%
62		E13_2	146.25	4.18	0.71%	2.20	1.10	20.00%
63		E13_3	146.25	4.18	0.71%	2.72	1.36	20.00%
64		E13_4	146.25	4.18	0.71%	3.14	1.57	20.00%
65		E13_5	146.25	4.18	0.71%	3.89	1.95	30.00%
66	REGIÓN 5	E14_1	191.25	4.78	1.51%	1.63	0.81	10.00%
67		E14_2	191.25	4.78	1.51%	2.20	1.10	20.00%
68		E14_3	191.25	4.78	1.51%	2.72	1.36	20.00%
69		E14_4	191.25	4.78	1.51%	3.14	1.57	20.00%
70		E14_5	191.25	4.78	1.51%	3.89	1.95	30.00%
71	REGIÓN 6	E15_1	236.25	5.24	3.32%	1.63	0.81	10.00%
72		E15_2	236.25	5.24	3.32%	2.20	1.10	20.00%
73		E15_3	236.25	5.24	3.32%	2.72	1.36	20.00%
74		E15_4	236.25	5.24	3.32%	3.14	1.57	20.00%
75		E15_5	236.25	5.24	3.32%	3.89	1.95	30.00%
76	REGIÓN 7	E16_1	281.25	6.94	6.00%	1.63	0.81	10.00%
77		E16_2	281.25	6.94	6.00%	2.20	1.10	20.00%
78		E16_3	281.25	6.94	6.00%	2.72	1.36	20.00%
79		E16_4	281.25	6.94	6.00%	3.14	1.57	20.00%
80		E16_5	281.25	6.94	6.00%	3.89	1.95	30.00%
81	REGIÓN 8	E17_1	326.25	5.60	3.31%	1.63	0.81	10.00%
82		E17_2	326.25	5.60	3.31%	2.20	1.10	20.00%
83		E17_3	326.25	5.60	3.31%	2.72	1.36	20.00%
84		E17_4	326.25	5.60	3.31%	3.14	1.57	20.00%
85		E17_5	326.25	5.60	3.31%	3.89	1.95	30.00%
86	REGIÓN 1	E18_1	11.25	7.92	1.03%	1.63	0.81	10.00%
87		E18_2	11.25	7.92	1.03%	2.20	1.10	20.00%
88		E18_3	11.25	7.92	1.03%	2.72	1.36	20.00%
89		E18_4	11.25	7.92	1.03%	3.14	1.57	20.00%
90		E18_5	11.25	7.92	1.03%	3.89	1.95	30.00%
91	REGIÓN 2	E19_1	56.25	6.52	0.96%	1.63	0.81	10.00%
92		E19_2	56.25	6.52	0.96%	2.20	1.10	20.00%
93		E19_3	56.25	6.52	0.96%	2.72	1.36	20.00%
94		E19_4	56.25	6.52	0.96%	3.14	1.57	20.00%

95	REGIÓN 3	E19_5	56.25	6.52	0.96%	3.89	1.95	30.00%
96		E20_1	101.25	7.30	5.63%	1.63	0.81	10.00%
97		E20_2	101.25	7.30	5.63%	2.20	1.10	20.00%
98		E20_3	101.25	7.30	5.63%	2.72	1.36	20.00%
99		E20_4	101.25	7.30	5.63%	3.14	1.57	20.00%
100	REGIÓN 4	E20_5	101.25	7.30	5.63%	3.89	1.95	30.00%
101		E21_1	146.25	7.00	0.62%	1.63	0.81	10.00%
102		E21_2	146.25	7.00	0.62%	2.20	1.10	20.00%
103		E21_3	146.25	7.00	0.62%	2.72	1.36	20.00%
104		E21_4	146.25	7.00	0.62%	3.14	1.57	20.00%
105	REGIÓN 5	E21_5	146.25	7.00	0.62%	3.89	1.95	30.00%
106		E22_1	191.25	7.67	1.44%	1.63	0.81	10.00%
107		E22_2	191.25	7.67	1.44%	2.20	1.10	20.00%
108		E22_3	191.25	7.67	1.44%	2.72	1.36	20.00%
109		E22_4	191.25	7.67	1.44%	3.14	1.57	20.00%
110	REGIÓN 6	E22_5	191.25	7.67	1.44%	3.89	1.95	30.00%
111		E23_1	236.25	8.29	1.33%	1.63	0.81	10.00%
112		E23_2	236.25	8.29	1.33%	2.20	1.10	20.00%
113		E23_3	236.25	8.29	1.33%	2.72	1.36	20.00%
114		E23_4	236.25	8.29	1.33%	3.14	1.57	20.00%
115	REGIÓN 7	E23_5	236.25	8.29	1.33%	3.89	1.95	30.00%
116		E24_1	281.25	11.39	3.42%	1.63	0.81	10.00%
117		E24_2	281.25	11.39	3.42%	2.20	1.10	20.00%
118		E24_3	281.25	11.39	3.42%	2.72	1.36	20.00%
119		E24_4	281.25	11.39	3.42%	3.14	1.57	20.00%
120	REGIÓN 8	E24_5	281.25	11.39	3.42%	3.89	1.95	30.00%
121		E25_1	326.25	9.46	1.66%	1.63	0.81	10.00%
122		E25_2	326.25	9.46	1.66%	2.20	1.10	20.00%
123		E25_3	326.25	9.46	1.66%	2.72	1.36	20.00%
124		E25_4	326.25	9.46	1.66%	3.14	1.57	20.00%
125		E25_5	326.25	9.46	1.66%	3.89	1.95	30.00%